

UNIVERSIDAD AUTÓNOMA DE MADRID
FACULTAD DE CIENCIAS
DEPARTAMENTO DE MATEMÁTICAS

La convergencia de las series de Fourier y su conexión con la Cristalografía

Pablo Fernández Gallardo

Tesis doctoral dirigida por D. Antonio Córdoba Barba
Madrid, noviembre de 1997

Ésta es una versión que difiere ligeramente de la depositada en la Facultad de Ciencias de la Universidad Autónoma de Madrid y en la que se han corregido algunas erratas detectadas tras la defensa pública de la memoria, que se celebró en el Departamento de Matemáticas el 15 de diciembre de 1997. El tribunal que la juzgó y que otorgó la calificación de apto *cum laude* por unanimidad estaba constituido por los siguientes profesores:

- Presidente: D. José Luis Fernández Pérez. Catedrático del Departamento de Matemáticas, Universidad Autónoma de Madrid.
- Vocal: D. Joaquim Bruna i Floris. Catedrático del Departamento de Matemáticas, Universitat Autònoma de Barcelona.
- Vocal: D. Miguel Ángel Herrero García. Catedrático del Departamento de Matemática Aplicada, Universidad Complutense de Madrid.
- Vocal: D. Luis Vega González. Catedrático del Departamento de Matemáticas, Universidad del País Vasco.
- Secretario: D. Eugenio Hernández Rodríguez. Profesor titular del Departamento de Matemáticas, Universidad Autónoma de Madrid.
- Suplente: D. Joan Verdera Melenchón. Catedrático del Departamento de Matemáticas, Universitat Autònoma de Barcelona.
- Suplente: D. Juan Antonio Barceló Valcárcel. Profesor titular del Departamento de Matemáticas, ETSI Caminos, Canales y Puertos, Universidad Politécnica de Madrid.

Madrid, 23 de diciembre de 1997.

A mi madre, que me ha dado raíces... y alas.
A mi familia.

*Ni el oro tan brillante, tan escaso en la desesperanzada vida de los mortales,
ni los fecundos campos de la vasta tierra, cargados de frutos, plenos de riqueza,
ni tampoco el diamante ni los lechos de plata, cosas preciosas para el hombre,
brillan ante los ojos como la comunión de pensamientos entre los hombres de bien*

PLATÓN: *Carta I.*

Índice

| | |
|---|-----------|
| Prefacio | iv |
| 1. El problema cristalográfico | 1 |
| 1.1. La difracción de la luz | 1 |
| 1.2. La difracción por cristales | 6 |
| 1.3. El problema de la fase | 14 |
| 1.3.1. Función de Patterson. Conjuntos homométricos | 15 |
| 1.3.2. Algunos ejemplos de recuperación de la fase | 21 |
| 1.3.3. Métodos de resolución del problema de la fase | 28 |
| 2. De series de Fourier reordenadas | 37 |
| 2.1. Introducción | 37 |
| 2.2. Sobre la divergencia puntual de los operadores $\tilde{\mathbf{S}}_{\lambda}$ | 39 |
| 2.2.1. Las sumas de Gauss | 40 |
| 2.2.2. Construcción del contraejemplo | 41 |
| 2.2.3. Prueba del Teorema 2 | 42 |
| 2.3. Sobre la divergencia en norma de los operadores $\tilde{\mathbf{S}}_{\lambda}$ | 45 |
| 2.3.1. Construcción básica | 49 |
| 2.3.2. Prueba del Teorema 3 | 50 |
| 2.4. Las sumas parciales modificadas | 53 |
| Bibliografía | 56 |

Prefacio

El material que se recoge en esta memoria es el resultado de un proyecto, quizá ambicioso, que iniciamos hace tiempo: se trataba de entender las técnicas y desarrollos matemáticos que se utilizan en distintos campos de la Ciencia e intentar justificarlos rigurosamente. En particular y por su estrecha relación con algunas técnicas del Análisis Armónico, nos interesamos en el trabajo de los cristalógrafos. En el camino encontramos cuestiones que conseguimos entender y otras que no tanto; nos planteamos conjeturas a las que supimos dar respuesta y otras a las que no. Construimos modelos sencillos que describían algunos resultados que encontramos en la literatura del área y otros que proporcionaban resultados nuevos. Este proceso está recogido en las páginas siguientes.

Los resultados matemáticos más relevantes que se pueden encontrar en esta memoria tienen que ver con el estudio de un método de sumación determinado para las series de Fourier. Creemos que el método como tal tiene un interés propio; asimismo lo tienen las técnicas que se utilizan en su análisis, como ejemplo de la estrecha relación que tienen campos diversos de las Matemáticas —en este caso, el Análisis Armónico y la Teoría de los Números—. Pero la razón que nos motivó a su estudio fue que este tipo de síntesis de Fourier es la que probablemente hacen muchos científicos en su labor diaria: aquél que utiliza un algoritmo de reconstrucción de imágenes, el que trata de desentrañar la estructura de un cristal. . . Por eso, la primera parte de la memoria trata de poner en contexto esos resultados, describiendo la formulación matemática de los problemas de la Cristalografía: trataremos de explicar el papel que la transformada de Fourier desempeña en los procesos de difracción por rayos X y su aplicación a la resolución de estructuras cristalinas, cuál es el problema fundamental que nos encontramos en este empeño y cuáles son las técnicas reales que se utilizan en los laboratorios. La mayoría de estas cuestiones son bien conocidas y pueden consultarse en las referencias que se citan en el trabajo, pero creemos que es bueno verlas escritas de manera compacta y, de algún modo, “traducidas” a un lenguaje más matemático. Confiamos en que la lectura de esta memoria resulte amena e interesante, tanto para aquél que se aproxime a ella desde el campo de las Matemática como para el que lo haga desde otras áreas, la Física, la Cristalografía. . .

Agradecimientos

Cuando hace unos años comencé mi reconversión de la Física a la Matemática, Antonio me sugirió como primeras lecturas algunos libros ya clásicos: el de Rudin, las monografías de Stein y de Stein-Weiss, la “biblia” de las series trigonométricas de Zygmund... Acostumbrado como estaba a manejar sin muchas precauciones series e integrales de Fourier, recuerdo lo que supuso descubrir la cantidad de problemas relacionados con las cuestiones de convergencia: al principio, sorpresa y desasosiego; luego fui conociendo —y degustando— las sutilezas del asunto. Al final, esta tesis doctoral versa sobre una forma particular de sumar series de Fourier y los problemas de convergencia que conlleva. ¿Qué puedo decir del papel que Antonio ha desempeñado en este proceso? Baste decir que sin él yo no estaría hoy escribiendo estas líneas. Gracias, Antonio, por haberme guiado, por haberme enseñado tantas matemáticas... y tantas otras cosas.

Y quiero agradecerle a la suerte el que me haya permitido conocer, en estos años, a mucha gente a la que hoy puedo llamar amigos.

Quid dulcis quam habere quicum omnia audeas sic loqui ut tecum?
Cicero, *De amicitia*, VI, 22.

O bien, ¿qué cosa más dulce que tener con quien hablar de todo tan libremente como con uno mismo? En este tiempo he convivido, he disfrutado del día a día con los que han sido, en algún momento, compañeros de despacho: Dani, Pedro, Ana, Alicia, Paco, Chema, Enrique. A todos, gracias por los buenos momentos que me habéis dado; y perdón por los malos que os haya hecho sufrir, en especial, por todo lo que supone convivir con un fumador.

No podría citar a todas las personas a las que tengo algo que agradecer, pero me es inevitable recordar a Fernando, a Raúl y a Omar (comprobamos que la distancia no es el olvido, ¿eh, Omar?), con los que he compartido más cosas. Esta época ha sido muy feliz, y ha sido gracias a ellos y a toda la gente del Departamento, que me han hecho sentir a gusto y querido.

Por último, un agradecimiento muy especial a Fernando Chamizo, por su papel como —excelente— lector.

Madrid, 20 de octubre de 1997.

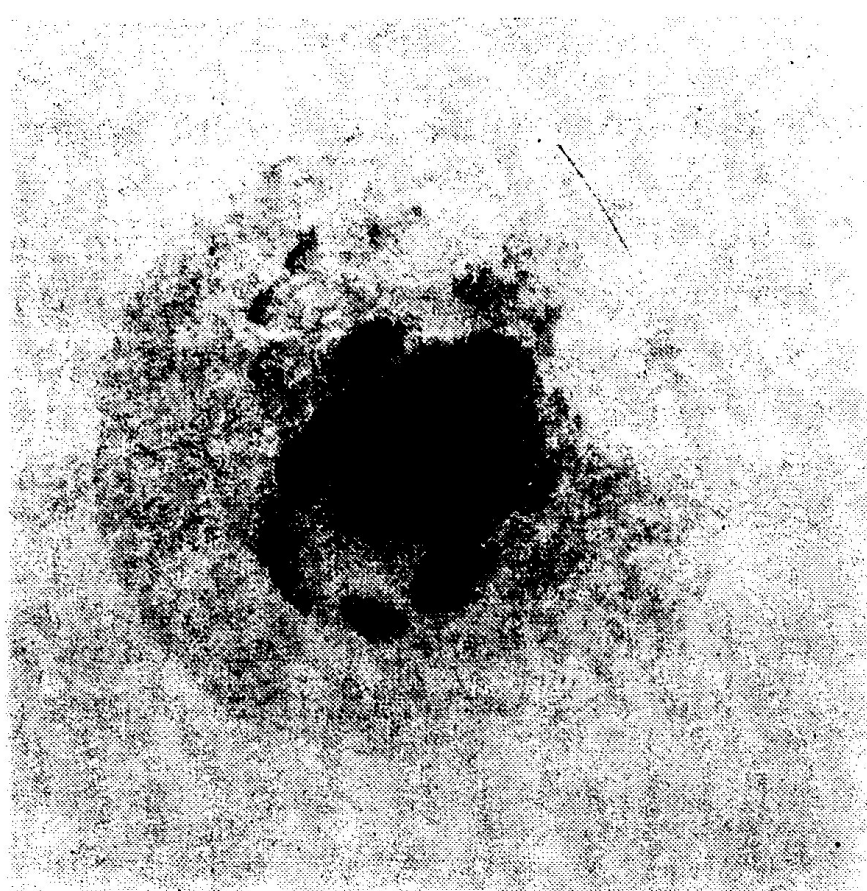


Figura 1. La primera fotografía de difracción por rayos X (Sulfato de cobre, Friedrich y Knipping, 1912).

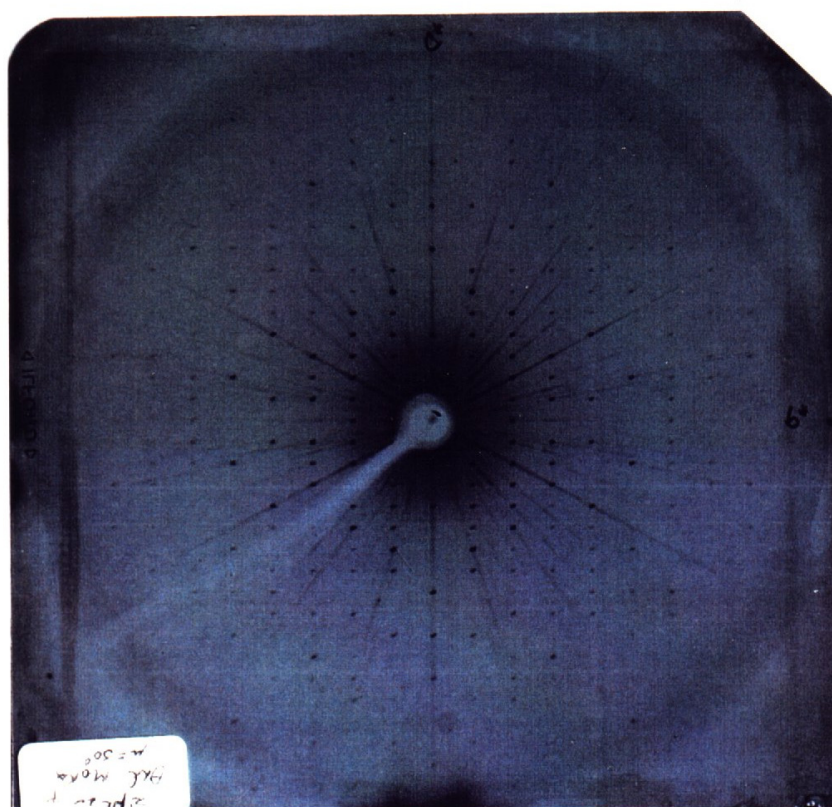


Figura 2. Fotografía de difracción por rayos X del plano $(0, k, l)$ de un cristal de $SiPb_2Se_4$ (cortesía de J.E. Iglesias)

Capítulo 1

El problema cristalográfico

1.1. La difracción de la luz

La búsqueda de un modelo que explicara la verdadera naturaleza de la luz (y de otros fenómenos que hoy sabemos que son manifestaciones del mismo hecho, la radiación electromagnética) ha sido uno de los grandes empeños de los hombres de ciencia a lo largo de la Historia. Los nombres que podemos asociar a su estudio constituyen una visita a la galería de los físicos y matemáticos ilustres que en el mundo han sido: Newton, Fermat, Huygens, Euler, Poisson, Maxwell, Einstein, Dirac...

La forma en que la luz se propaga justifica que las primeras explicaciones se construyeran sobre modelos corpusculares; lo que permitió describir, con sencillas construcciones geométricas, muchos fenómenos ópticos. Pero pronto se comprobó experimentalmente que, en ciertas situaciones, la luz se comportaba de forma anómala. Entre otras, en lo que podemos llamar *fenómenos de difracción*. Nos podemos remontar a Leonardo Da Vinci para encontrar las primeras alusiones a fenómenos de este tipo. En 1665, Grimaldi observó la presencia de luz en zonas en las que el modelo geométrico predecía sombra.

En los años finales de ese siglo se produjeron numerosas aportaciones a este campo. Hooke, que realizó observaciones semejantes a las de Grimaldi, propuso que la luz consistía en rápidas vibraciones que se propagaban instantáneamente (o casi). Huygens sugirió que cualquier punto del éter (¡ah!, la vieja cuestión de la existencia del éter) al que llegaba una perturbación luminosa se convertía en centro de nuevas perturbaciones que se propagaban esféricamente; y que se combinaban de forma que su envolvente definía el frente de ondas posterior.

Los problemas que estas teorías ondulatorias encontraban a la hora de explicar algunos fenómenos básicos condujeron a Newton a formular su propia teoría, un modelo de emisión, corpuscular. El rechazo de Newton a la teoría ondulatoria pareció acallar durante casi un siglo a los partidarios de ésta última.

En 1818, la Academia de París propuso para su premio anual el problema de la difracción, con la esperanza de que se confirmara finalmente el modelo corpuscular. Sorprendentemente, el premio le fue concedido a la memoria presentada por Fresnel, que se basaba en un tratamiento ondulatorio de la luz. Y le fue concedido tras fuertes discusiones entre los miembros del comité. Uno de ellos, Poisson, basándose en la construcción de Fresnel y para refutarla, predijo la presencia de luz en el centro de la sombra de un pequeño disco, algo contrario a la intuición —y al experimento—. Pero Arago, otro miembro del comité, construyó un dispositivo (que todavía se conserva en la École Polytechnique de París) con el que le demostró que la predicción era correcta. Desde entonces Poisson se convirtió en un entusiasta apoyo a la teoría ondulatoria.

Por supuesto, la historia no acaba ahí. Grandes nombres aparecen en el desarrollo posterior: Hamilton, Navier, Cauchy, Green, Stokes, Lord Kelvin, Lord Rayleigh, Kirchhoff, ... La teoría electromagnética de Maxwell permitió explicar satisfactoriamente la propagación de la luz. Pero los fenómenos de emisión e interacción con la materia debieron esperar para ser explicados a las teorías cuánticas y a las aportaciones de Planck, Einstein, Dirac, De Broglie, ... Al final, Newton y su tratamiento corpuscular y geométrico (con otras partículas y otras Geometrías, quizá) no estaban tan desencaminados...

Volvamos al modelo de Fresnel-Huygens de la difracción de la luz (o mejor, a la formulación matemática que de él hizo Kirchhoff). Aunque pueda resultar poco satisfactorio desde un punto de vista teórico —por cuanto no se deduce de primeros principios— es suficiente para explicar los espectros de difracción que se obtienen experimentalmente. La idea básica de este modelo es que la perturbación luminosa en un punto responde a la superposición de ondas secundarias procedentes de una superficie situada entre el punto y la fuente luminosa. La justificación de Kirchhoff de este principio se basa en una cierta fórmula integral. Para obtenerla, empecemos considerando una onda monocromática de la forma

$$v(x, y, z, t) = u(x, y, z)e^{i\omega t},$$

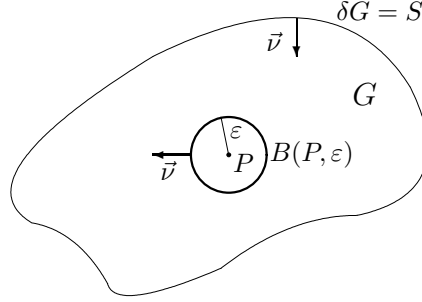
que será solución de la ecuación de ondas

$$\Delta v - \frac{1}{c^2} \frac{\partial^2 v}{\partial t^2} = 0$$

si la función u verifica la ecuación de Helmholtz $\Delta u + k^2 u = 0$, con $k^2 = \frac{\omega^2}{c^2}$. Sea ahora S una superficie lisa que encierra un dominio acotado G ($S = \partial G$), y sea P un punto interior. Para poder construir un modelo de difracción, necesitamos saber si es posible hallar $u(P)$ a partir de $u|_S$ y $\frac{\partial u}{\partial \nu}|_S$ (donde ν es la normal interior a la superficie). Tomemos la función

$$u'(x, y, z) = \frac{e^{iks}}{s},$$

donde s representa la distancia del punto P al punto (x, y, z) . Es fácil comprobar que satisface la ecuación de Helmholtz excepto en el punto P , donde tiene una singularidad. Consideremos una bola $B = B(P, \varepsilon)$ centrada en P y de radio ε lo suficientemente pequeño como para que esté incluida en G .



Si llamamos $D = \overline{G} \setminus B(P, \varepsilon)$ y suponemos que u tiene primeras y segundas derivadas continuas en este dominio (u' las tiene por construcción), podemos aplicar la fórmula de Green

$$\iiint_D (u \Delta u' - u' \Delta u) dx dy dz = \iint_{\partial D} \left(u \frac{\partial u'}{\partial \nu} - u' \frac{\partial u}{\partial \nu} \right) dS.$$

El integrando de la izquierda es nulo, y la frontera de D tiene dos partes; así que podemos escribir

$$\begin{aligned} \iint_S \left\{ u \frac{\partial}{\partial \nu} \left(\frac{e^{iks}}{s} \right) - \frac{e^{iks}}{s} \frac{\partial u}{\partial \nu} \right\} dS &= - \iint_{\partial B} \left\{ u \frac{\partial}{\partial \nu} \left(\frac{e^{iks}}{s} \right) - \frac{e^{iks}}{s} \frac{\partial u}{\partial \nu} \right\} dB \\ &= - \iint_{\partial B} \left\{ u \frac{e^{iks}}{s} \left(ik - \frac{1}{s} \right) - \frac{e^{iks}}{s} \frac{\partial u}{\partial \nu} \right\} dB \\ &= - \iint_{\Omega} \left\{ iku \frac{e^{ik\varepsilon}}{\varepsilon} - u \frac{e^{ik\varepsilon}}{\varepsilon^2} - \frac{e^{ik\varepsilon}}{\varepsilon} \frac{\partial u}{\partial \nu} \right\} \varepsilon^2 d\Omega, \end{aligned}$$

donde $d\Omega$ representa el elemento de ángulo sólido. Si evaluamos el límite $\varepsilon \rightarrow 0$ y aplicamos convergencia dominada, podemos comprobar que sólo el segundo término del integrando de la derecha contribuye y obtener

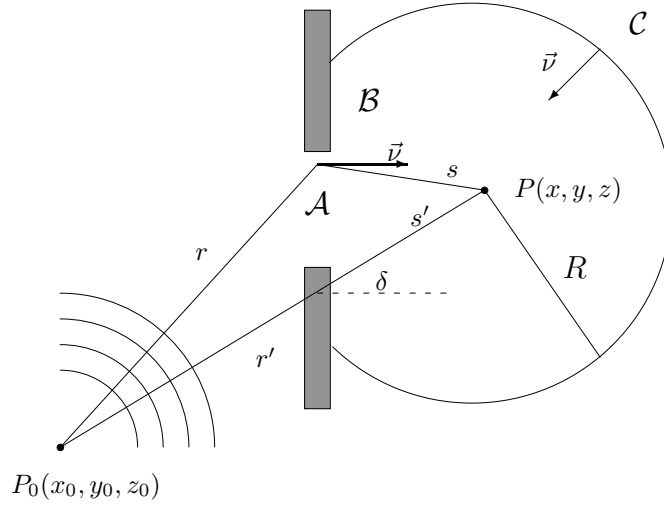
$$u(P) = \frac{1}{4\pi} \iint_S \left\{ u \frac{\partial}{\partial \nu} \left(\frac{e^{iks}}{s} \right) - \frac{e^{iks}}{s} \frac{\partial u}{\partial \nu} \right\} dS,$$

expresión integral que responde a nuestra pregunta inicial.

¿Cómo podemos aplicar esta expresión al cálculo de la figura de difracción producida por, por ejemplo, una apertura en una pantalla? Consideremos de nuevo una fuente luminosa P_0 que emite una onda monocromática de amplitud A y número de ondas k y llamemos P al punto en el que queremos determinar la perturbación luminosa u . Antes de llegar a la pantalla

$$u = A \frac{e^{ikr}}{r},$$

donde r es la distancia a la fuente P_0 .



Utilicemos la fórmula integral de Kirchhoff sobre la superficie S formada por

1. \mathcal{A} , la apertura,
2. \mathcal{B} , una porción de la parte no iluminada de la pantalla,
3. \mathcal{C} , una parte de la superficie esférica de radio grande R centrada en P .

Los valores de u y $\frac{\partial u}{\partial \nu}$ en \mathcal{B} son nulos, y en \mathcal{A} coinciden aproximadamente con el valor que tendrían si no estuviera la pantalla,

$$u = A \frac{e^{ikr}}{r},$$

$$\frac{\partial u}{\partial \nu} = \frac{\partial}{\partial \nu} \left(A \frac{e^{ikr}}{r} \right) = \frac{A e^{ikr}}{r} \left(ik - \frac{1}{r} \right) \cos \alpha_{\vec{r}},$$

donde $\alpha_{\vec{r}}$ es el ángulo formado por el vector \vec{r} con la pantalla. Por último, si hacemos que el radio sea suficientemente grande, la contribución de \mathcal{C} se puede considerar nula (con las oportunas hipótesis sobre el decrecimiento de la función de onda en el infinito), con lo que nos quedaría

$$u(P) = \frac{A}{4\pi} \iint_{\mathcal{A}} \frac{e^{ik(r+s)}}{rs} \left[\left(ik - \frac{1}{s} \right) \cos \alpha_{\vec{s}} - \left(ik - \frac{1}{r} \right) \cos \alpha_{\vec{r}} \right] dS.$$

Vamos con las aproximaciones que nos permiten hacer manejable esta expresión. Supongamos que r y s son muy grandes (P y P_0 muy alejados de la pantalla) comparados con las dimensiones de la apertura y como el número de ondas k (para la luz visible, del orden de 10^6 metros) es mucho mayor que los inversos de r y s , el término principal de la integral será

$$u(P) = -\frac{Ai}{2\lambda} \iint_{\mathcal{A}} \frac{e^{ik(r+s)}}{rs} [\cos \alpha_{\vec{r}} - \cos \alpha_{\vec{s}}] dS.$$

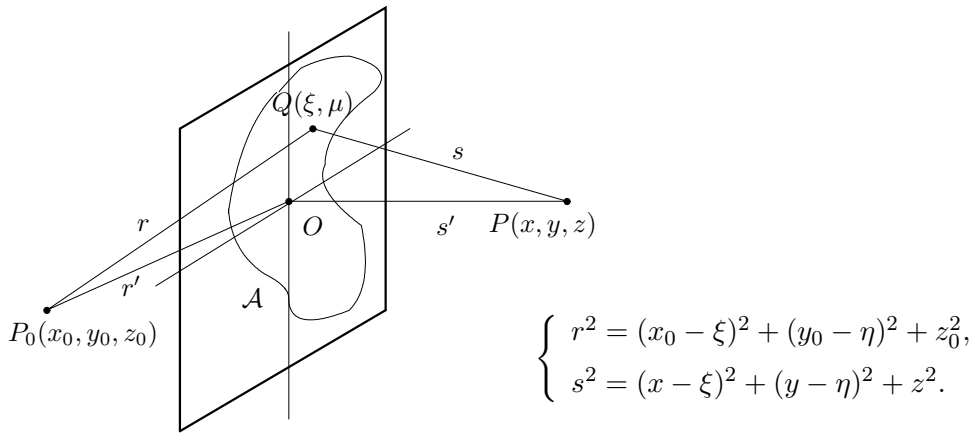
En el dominio de integración el factor $e^{ik(r+s)}$ oscilará muy rápidamente. Pero el producto $r \cdot s$ y la diferencia de cosenos no variarán demasiado, y podremos sustituir

$$\begin{cases} \cos \alpha_{\vec{r}} - \cos \alpha_{\vec{s}} \approx 2 \cos \delta, \\ r \cdot s \approx r' \cdot s', \end{cases}.$$

(véase el dibujo para identificar δ , r' y s'), con lo que nos queda

$$u(P) \approx -\frac{Ai \cos \delta}{\lambda r' s'} \iint_{\mathcal{A}} e^{ik(r+s)} dS.$$

Escojamos unos parámetros ópticos ajustados a la geometría del problema:



Con esta notación, la expresión integral se escribirá

$$u(P) = \underbrace{-e^{ik(r'+s')} \frac{Ai \cos \delta}{\lambda r' s'}}_C \iint_{\mathcal{A}} e^{ikf(\xi, \eta)} dS,$$

donde

$$f(\xi, \eta) = (l - l_0)\xi + (m - m_0)\eta + \frac{1}{2} \left(\frac{1}{r'} + \frac{1}{s'} \right) (\xi^2 + \eta^2) + O\left(\frac{1}{r'^3}\right) + O\left(\frac{1}{s'^3}\right)$$

y hemos llamado a los cosenos directores

$$\begin{aligned} l_0 &= -x_0/r' & l &= x/s' \\ m_0 &= -y_0/r' & m &= y/s'. \end{aligned}$$

Finalmente, si llamamos $p = l_0 - l$ y $q = m - m_0$ y sólo retenemos los términos hasta primer orden, obtenemos la *integral de Fraunhofer* de la difracción,

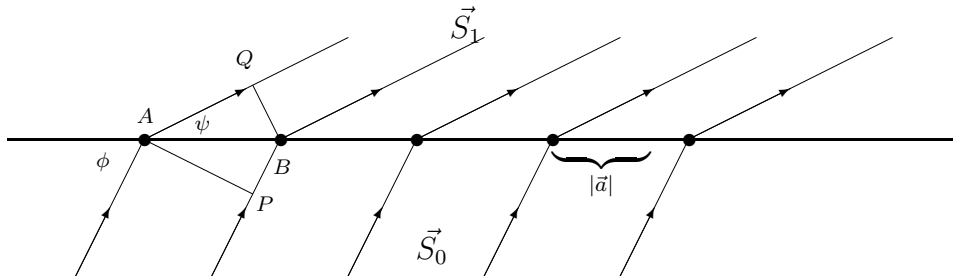
$$u(P) = C \iint_{\mathcal{A}} e^{-ik(p\xi + q\eta)} d\xi d\eta = C \hat{\chi}_{\mathcal{A}}(pk, qk).$$

Si retuviéramos los términos hasta segundo orden, tendríamos la *integral de Fresnel-Schrödinger* de la difracción. Pero la primera aproximación de Fraunhofer es suficiente para calcular las figuras de difracción para una gran cantidad de problemas, una apertura rectangular, una circular, etc. En cualquier manual de Óptica se pueden encontrar estos ejemplos en detalle (véanse, *e.g.*, [4, 9]). Es en esta aproximación en la que la transformada de Fourier aparece por vez primera en estos problemas ópticos. Comprobaremos su ubicuidad en los próximos contextos que analicemos.

1.2. La difracción por cristales

En el otoño de 1895, el físico alemán Röntgen descubrió un tipo de radiación que tenía algunas propiedades sorprendentes y a la que bautizó con el nombre de rayos X. Pese a que su uso con fines científicos y terapéuticos se extendió rápidamente (con consecuencias dramáticas en muchos casos), su verdadera naturaleza no acababa de ser dilucidada. Se intuía que se trataba de una radiación electromagnética análoga a la luz, pero los intentos de conseguir su difracción mediante una red no fructificaban. Sin embargo, algunos experimentos sugerían que su hipotética longitud de onda debería ser del orden del amstrong. Para entonces, se empezaba a creer que los cristales estaban constituidos por una ordenación tridimensional periódica de átomos. Cálculos basados en la densidad de los cristales también habían fijado las distancias medias interatómicas en torno al amstrong. En 1912, Von Laue había descrito en su tesis doctoral un modelo de cristal constituido por pequeños osciladores dispuestos en una red periódica tridimensional. Y llegó a la conclusión de que un cristal podría ser una red de difracción adecuada para los rayos X. Esta inspirada predicción fue confirmada experimentalmente por Frederich y Knipping unos meses después. Von Laue recibió el Nobel en 1914 por la elaboración de su teoría de la difracción de los rayos X por cristales.

¿Cuál era su modelo? Imaginemos una fila de centros dispersores espaciados una cantidad fija a . Si enviamos sobre ella un haz de rayos X con un ángulo de incidencia ϕ , el haz dispersado saldrá con un cierto ángulo ψ .



Para que tengamos interferencia constructiva, la diferencia de caminos entre dos rayos dispersados,

$$\delta = AQ - BP = |\vec{a}| (\cos \psi - \cos \phi),$$

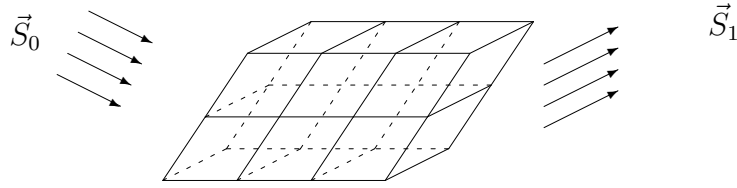
deberá ser un múltiplo entero de la longitud de onda de la radiación incidente

$$|\vec{a}| (\cos \psi - \cos \phi) = h \lambda,$$

o, escrito en términos de los vectores unitarios \vec{S}_0 y \vec{S}_1 (véase dibujo),

$$\vec{a} \cdot \underbrace{\frac{\vec{S}_0 - \vec{S}_1}{\lambda}}_{\vec{s}} = h.$$

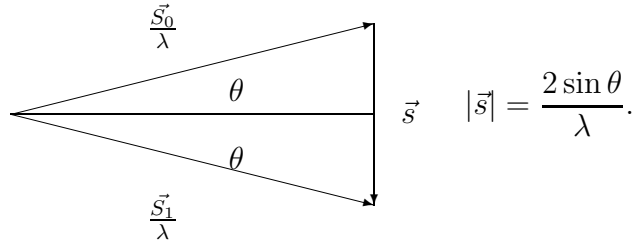
Análogamente, si tenemos una red tridimensional definida por tres vectores \vec{a} , \vec{b} y \vec{c} ,



podemos comprobar que los vectores \vec{s} para los que se produce interferencia constructiva son aquellos que satisfacen simultáneamente las condiciones

$$\begin{cases} \vec{a} \cdot \vec{s} = h, \\ \vec{b} \cdot \vec{s} = k, \\ \vec{c} \cdot \vec{s} = l, \end{cases}$$

donde h , k y l son enteros. Éstas son las llamadas *condiciones de Laue* de la difracción. Nótese que los vectores \vec{S}_0 , \vec{S}_1 y \vec{s} son coplanares y que el módulo de \vec{s} determina el ángulo formado por el rayo incidente y el difundido:



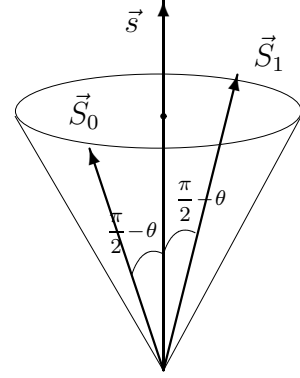
Busquemos posibles valores de \vec{s} que satisfagan estas condiciones. Los vectores del retículo \vec{a} , \vec{b} y \vec{c} forman una base B de \mathbb{R}^3 y les podremos asociar la base dual $B^* = \{\vec{a}^*, \vec{b}^*, \vec{c}^*\}$ definida por

$$\begin{cases} \vec{a} \cdot \vec{a}^* = 1 & \vec{a} \cdot \vec{b}^* = 0 & \vec{a} \cdot \vec{c}^* = 0 \\ \vec{b} \cdot \vec{a}^* = 0 & \vec{b} \cdot \vec{b}^* = 1 & \vec{b} \cdot \vec{c}^* = 0 \\ \vec{c} \cdot \vec{a}^* = 0 & \vec{c} \cdot \vec{b}^* = 0 & \vec{c} \cdot \vec{c}^* = 1. \end{cases}$$

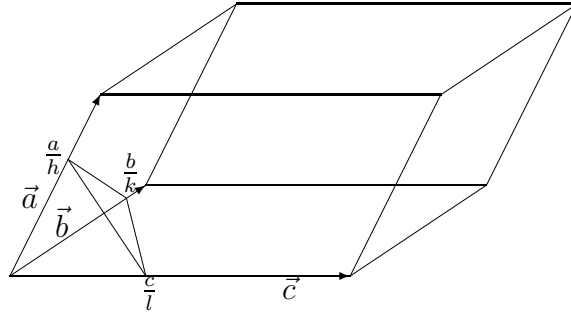
En la notación cristalográfica, estos tres nuevos vectores definen el llamado retículo dual o *red recíproca*. Es obvio que una solución de las ecuaciones de Laue viene dada por $\vec{s} = h \vec{a}^* + k \vec{b}^* + l \vec{c}^*$.

Esto nos proporciona una receta para detectar los rayos difractados: a partir del retículo cristalino, calculamos la red recíproca (una sencilla construcción geométrica permite hacerlo), que nos da el vector \vec{s} . Su módulo nos da el ángulo θ de difracción:

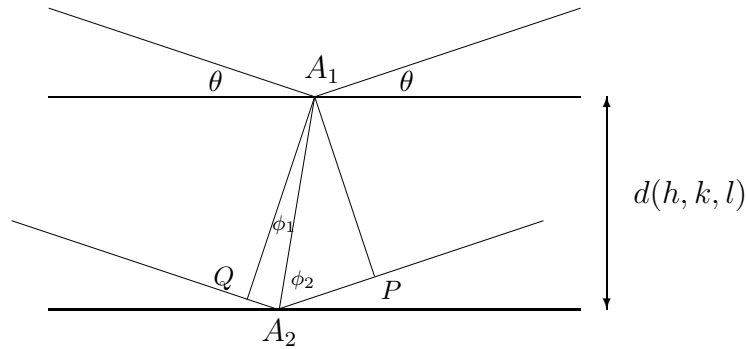
Basta orientar el cristal (y por tanto \vec{s}) de forma que el rayo incidente forme un ángulo $\pi/2 - \theta$ con \vec{s} para que observemos el reflejado, que formará un ángulo igual en el plano definido por los dos anteriores.



En torno a 1913, los Bragg (padre e hijo) realizaron una serie de experimentos buscando la reflexión de los rayos X por un cristal. La interpretación de los resultados obtenidos en términos de la disposición de los átomos en el cristal les valió el Nobel de Física de 1915; y, sobre todo, les permitió establecer, por vez primera, un método para resolver estructuras cristalinas (el joven Bragg consiguió determinar en pocos años las estructuras de ClNa , IK , F_2Ca , diamante, etc.). Lo que los Bragg proponían era que los rayos X eran reflejados parcialmente por los planos del cristal. En la notación habitual de la Cristalografía, los distintos planos de un cristal se etiquetan con los llamados *índices de Miller*: dada una celda unidad definida por tres vectores \vec{a} , \vec{b} y \vec{c} , llamaremos plano de índices (h, k, l) a aquél que intercepta los lados de la celda unidad en los puntos $\frac{a}{h}$, $\frac{b}{k}$ y $\frac{c}{l}$.



Consideremos entonces dos planos (h, k, l) consecutivos.



De nuevo, la diferencia de caminos entre los dos rayos será

$$\begin{aligned}
 \delta &= \overline{QA_2} + \overline{A_2P} = \overline{A_1A_2}(\cos \phi_1 + \cos \phi_2) \\
 &= 2\overline{A_1A_2} \cos \left(\frac{\phi_1 - \phi_2}{2} \right) \cos \left(\frac{\phi_1 + \phi_2}{2} \right) \\
 &= 2 \frac{d(h, k, l)}{\sin(\theta + \phi_2)} \cos \left(\frac{\pi - 2(\theta + \phi_2)}{2} \right) \cos \left(\frac{\pi - 2\theta}{2} \right) \\
 &= 2d(h, k, l) \sin \theta,
 \end{aligned}$$

independientemente de ϕ_1 y ϕ_2 (las posiciones relativas de A_1 y A_2). La interferencia de los rayos reflejados será constructiva si

$$2d(h, k, l) \sin \theta = n\lambda,$$

donde n es el orden de la reflexión de Bragg. Utilizando que los índices de Miller de un cristal cumplen que

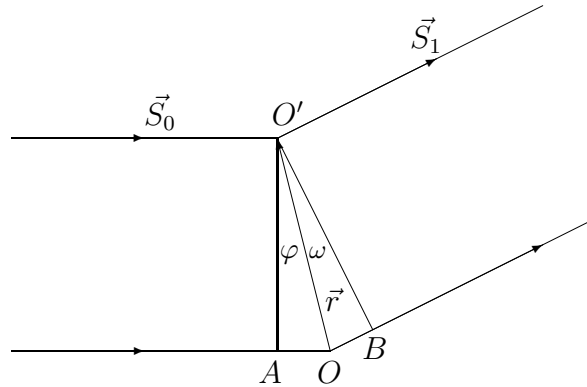
$$d(nh, nk, nl) = \frac{d(h, k, l)}{n},$$

podemos obtener la ley de Bragg

$$2d(nh, nk, nl) \sin \theta = \lambda$$

e interpretar que cada reflexión de Bragg es una de primer orden por la familia (h, k, l) .

Éstos son modelos sencillos, pero dan lugar a resultados que reproducen lo que el experimento proporciona. Para sentirnos más cómodos como matemáticos, demos cuenta de un modelo de difracción de rayos X que utiliza herramientas a las que estamos más habituados. Empecemos considerando dos centros dispersores, O y O' , de la radiación incidente:



La diferencia de caminos será

$$\delta = \overline{AO} + \overline{O'B} = r(\sin \varphi + \sin \omega) = (\vec{S}_1 - \vec{S}_0) \cdot \vec{r},$$

que dará lugar a una diferencia de fase

$$\phi = \frac{2\pi\delta}{\lambda} = 2\pi \underbrace{\frac{\vec{S}_1 - \vec{S}_0}{\lambda}}_{\vec{s}} \cdot \vec{r} = 2\pi(\vec{s} \cdot \vec{r}).$$

Si A_O es la amplitud de la onda dispersada por O (suponemos fase cero), la dispersada por O' será $A_{O'} e^{2\pi i(\vec{s} \cdot \vec{r})}$. Si tenemos N dispersores en el camino de la onda incidente, la onda dispersada será

$$F(\vec{s}) = \sum_{j=1}^N A_j e^{2\pi i \vec{s} \cdot \vec{r}_j},$$

donde A_j es lo que se llama *factor de scattering* del centro dispersor j -ésimo. Si lo que tenemos es un continuo con densidad electrónica $\rho(\vec{r})$, la onda dispersada por un elemento de volumen $d^3\vec{r}$ será

$$\rho(\vec{r}) e^{2\pi i \vec{s} \cdot \vec{r}} d^3\vec{r},$$

Así que la onda dispersada por todo el volumen será

$$F(\vec{s}) = \int_V \rho(\vec{r}) e^{2\pi i \vec{s} \cdot \vec{r}} d^3\vec{r},$$

¡la transformada de Fourier de la densidad electrónica! Si tenemos un cristal, podemos representar un retículo tridimensional infinito por

$$L(\vec{r}) = \sum_{u,v,w=-\infty}^{\infty} \delta(\vec{r} - \vec{r}_{uvw}),$$

donde $\vec{r}_{uvw} = u\vec{a} + v\vec{b} + w\vec{c}$. Llamemos $\rho_M(\vec{r})$ a la densidad electrónica de la celda unidad. La densidad electrónica de todo el cristal será

$$\rho_{\infty}(\vec{r}) = \sum_{u,v,w=-\infty}^{\infty} \rho_M(\vec{r} - \vec{r}_{uvw}) = \sum_{u,v,w=-\infty}^{\infty} \delta(\vec{r} - \vec{r}_{uvw}) * \rho_M(\vec{r}) = [\rho_M * L](\vec{r}).$$

Por tanto, la onda dispersada por la densidad electrónica del cristal será

$$F_{\infty}(\vec{s}) = \hat{\rho}(\vec{s}) \hat{L}(\vec{s}).$$

El primer factor es la onda dispersada por la celda unidad, $F_M(\vec{s})$ para seguir la notación anterior. Para tratar el segundo, consideremos una red finita

$$\mu(\vec{r}) = \sum_{u=-p_1}^{p_1} \sum_{v=-p_2}^{p_2} \sum_{w=-p_3}^{p_3} \delta(\vec{r} - \vec{r}_{uvw}).$$

Su transformada de Fourier será

$$\begin{aligned}
 \hat{\mu}(\vec{s}) &= \sum_{u,v,w} e^{2\pi i \vec{s} \cdot \vec{r}_{uvw}} \\
 &= \sum_{u=-p_1}^{p_1} e^{2\pi i u \vec{s} \cdot \vec{a}} \sum_{v=-p_2}^{p_2} e^{2\pi i v \vec{s} \cdot \vec{b}} \sum_{w=-p_3}^{p_3} e^{2\pi i w \vec{s} \cdot \vec{c}} \\
 &= \frac{\sin[\pi(2p_1+1)(\vec{s} \cdot \vec{a})]}{\sin[\pi(\vec{s} \cdot \vec{a})]} \frac{\sin[\pi(2p_2+1)(\vec{s} \cdot \vec{b})]}{\sin[\pi(\vec{s} \cdot \vec{b})]} \frac{\sin[\pi(2p_3+1)(\vec{s} \cdot \vec{c})]}{\sin[\pi(\vec{s} \cdot \vec{c})]}.
 \end{aligned}$$

Cada uno de estos factores es máximo cuando \vec{s} satisface

$$\begin{cases} \vec{s} \cdot \vec{a} = h, \\ \vec{s} \cdot \vec{b} = k, \\ \vec{s} \cdot \vec{c} = l, \end{cases}$$

es decir, cuando \vec{s} coincide con $\vec{s}_{hkl} = h\vec{a}^* + k\vec{b}^* + l\vec{c}^*$, donde

$$\vec{a}^* = \frac{\vec{b} \times \vec{c}}{V}, \quad \vec{b}^* = \frac{\vec{c} \times \vec{a}}{V}, \quad \vec{c}^* = \frac{\vec{a} \times \vec{b}}{V}, \quad V = \vec{a} \cdot (\vec{b} \times \vec{c}),$$

¡cuando \vec{s} es un vector de la red recíproca! En el límite $p_1, p_2, p_3 \rightarrow \infty$, tendremos una suma de deltas de Dirac en los puntos de la red recíproca, con peso $1/V$. Por tanto,

$$\hat{L}(\vec{s}) = \frac{1}{V} \sum_{h,k,l=-\infty}^{\infty} \delta(\vec{s} - \vec{s}_{hkl}),$$

con lo que concluimos que

$$F_{\infty}(\vec{s}) = \frac{F_M(\vec{s})}{V} \sum_{h,k,l=-\infty}^{\infty} \delta(\vec{s} - \vec{s}_{hkl}).$$

Es decir, el valor de F_{∞} es cero excepto en los puntos de la red recíproca; en ellos, el peso es $F_M(\vec{s}_{hkl})/V$, para cada triplete (h, k, l) (que identifica el nodo). Lo que realmente se mide en el espectro de difracción es una intensidad que es proporcional al cuadrado de estos pesos.

En principio el problema parece resuelto si conocemos los valores de F_{∞} , porque, haciendo la transformada inversa de Fourier,

$$\rho(\vec{r}) = \int_{V^*} F_{\infty}(\vec{s}) e^{-2\pi i \vec{s} \cdot \vec{r}} d^3 \vec{s} = \frac{1}{V} \sum_{h,k,l=-\infty}^{\infty} F_{hkl} e^{-2\pi i (hx+ky+lz)},$$

donde $F_{hkl} = F_M(\vec{s}_{hkl}) = \int_V \rho(x, y, z) e^{2\pi i (hx+ky+lz)} dx dy dz$. En el contexto cristalográfico los F_{hkl} se suelen llamar *factores de estructura*, y no son sino los

coeficientes del desarrollo de Fourier de la densidad electrónica del cristal. Si a partir del espectro de difracción consiguiéramos conocerlos todos, podríamos reconstruir la densidad electrónica del cristal. Las consideraciones acerca de cómo se debería realizar esta síntesis de Fourier son el objeto del Capítulo 2 de esta memoria.

Pero se nos presenta un problema previo: como comentábamos, el espectro de difracción nos proporciona información sólo sobre los módulos de los factores de estructura. Surge entonces el problema fundamental de la Cristalografía, *el problema de la fase*:

¿cómo podemos identificar las posiciones atómicas—reconstruir la densidad electrónica— si sólo conocemos los valores $|F_{hkl}|$ para cada triplete de enteros (h, k, l) , es decir, si hemos perdido la información sobre la fase de los coeficientes de Fourier?

Las próximas secciones están dedicadas al estudio de algunos aspectos de este problema.

Planteémonos ahora una cuestión básica: en realidad, ¿qué es un cristal? Un cristalógrafo clásico contestaría que un cristal consta de un retículo y una base atómica unida a él. Un paradigma cristalográfico reza que si tenemos un espectro de difracción con picos de Bragg aislados, entonces necesariamente la estructura difractante es un cristal. ¿Se puede justificar matemáticamente este hecho y, de paso, confirmar la definición de cristal dada arriba? Recordemos la conocida fórmula de sumación de Poisson

$$\sum_{\nu \in \mathbb{Z}^n} f(\nu) = \sum_{\mu \in \mathbb{Z}^n} \hat{f}(\mu),$$

que es válida para toda función $f \in \mathcal{S}$, las funciones infinitamente derivables con decrecimiento rápido en infinito (en realidad, es válida para funciones más generales). Una forma de interpretarla es que la distribución temperada $\sum_{\nu \in \mathbb{Z}^n} \delta_\nu$ coincide con su transformada de Fourier. En el contexto cristalográfico, una tal distribución se llama peine de Dirac, y es un modelo natural de un cristal monoatómico. Lo que la fórmula de sumación de Poisson nos dice es que el espectro de difracción de esa estructura es, de nuevo, una suma de deltas de Dirac (¡los picos de Bragg!) situadas en los puntos del retículo \mathbb{Z}^n .

Podríamos buscar otras particiones discretas de \mathbb{R}^n en las que la fórmula de sumación de Poisson funcione. Un primer intento es obtener otro retículo mediante una aplicación lineal: sea A un isomorfismo lineal de \mathbb{R}^n en sí mismo y consideremos los conjuntos de puntos $\{x_\nu\}$ e $\{y_\mu\}$ dados por

$$\begin{cases} x_\nu = A \cdot \nu, \\ y_\mu = (A^{-1})^t \cdot \mu \end{cases} \quad \nu, \mu \in \mathbb{Z}^n.$$

Démonos una función test $\phi \in \mathcal{S}$ y evaluemos

$$\begin{aligned}
\sum_{\nu \in \mathbb{Z}^n} \phi(x_\nu) &= \sum_{\nu \in \mathbb{Z}^n} (\phi \circ A)(\nu) = \sum_{\mu \in \mathbb{Z}^n} \widehat{(\phi \circ A)}(\mu) \\
&= \sum_{\mu \in \mathbb{Z}^n} \int_{\mathbb{R}^n} e^{-2\pi i x \cdot \mu} \phi(A(x)) d^n x \\
&= \sum_{\mu \in \mathbb{Z}^n} \int_{\mathbb{R}^n} e^{-2\pi i A^{-1} y \cdot \mu} \phi(y) \det(A^{-1}) d^n y \\
&= \det(A^{-1}) \sum_{\mu \in \mathbb{Z}^n} \widehat{\phi}(y_\mu).
\end{aligned}$$

Pero podríamos preguntarnos si los conjuntos $\{x_\nu\}$ e $\{y_\mu\}$ descritos arriba son los únicos para los que tenemos una fórmula de sumación de Poisson. En [12] se puede ver una prueba del siguiente resultado en ese sentido.

Teorema (A. Córdoba). *Consideremos dos subconjuntos discretos $\{x_k\}$ e $\{y_j\}$ de \mathbb{R}^n y unos números positivos $c_k > 0$ de manera que las distribuciones temperadas $\mu_1 = \sum c_k \delta_{x_k}$ y $\mu_2 = \sum \delta_{y_j}$ verifican que*

$$\widehat{\mu}_1 = \mu_2.$$

Entonces existe una aplicación lineal A de \mathbb{R}^n en sí mismo, con $\det(A) = 1$ de forma que

$$\begin{cases} \{x_k\} = A(\mathbb{Z}^n) \\ \{y_j\} = (A^{-1})^t(\mathbb{Z}^n) \end{cases}$$

y, en particular, $c_k = 1$, para todo k .

Un caso más general sería considerar una distribución que asignara diferentes masas a la distintas deltas de Dirac. En este sentido, se tiene:

Teorema (A. Córdoba). *Sea el conjunto $\Lambda = \cup_{j=1}^N \Lambda_j$ una unión finita disjunta de subconjuntos de \mathbb{R}^n de forma que exista una cota inferior a la distancia entre cualesquiera dos puntos de Λ . Para ciertos números complejos $\{a_j\}_{j=1}^N$, consideramos la distribución temperada*

$$\mu = \sum_{j=1}^N a_j \sum_{x \in \Lambda_j} \delta_{x_j}.$$

Supongamos que su transformada de Fourier se puede expresar como

$$\widehat{\mu} = \sum_{\alpha} b_{\alpha} \delta_{y_{\alpha}}, \quad \text{con} \quad \sum_{y_{\alpha} \in Q} |b_{\alpha}| \leq C < \infty$$

para todo cubo unidad $Q \in \mathbb{R}^n$. Entonces, cada conjunto Λ_j es una unión finita disjunta de retículos n -dimensionales.

No es difícil comprobar que si exigimos que haya también una distancia mínima en el lado de la transformada de Fourier, obtenemos la definición clásica de cristal: esa condición extra exige una relación de racionalidad entre los parámetros de los retículos, de forma que podremos escoger uno que los englobe a todos y al que vaya unida una base atómica. Pero sin ella, podríamos tener lo que los físicos llaman *fases irracionales*, que amplían el concepto de cristal. Pero si de ampliarlo se trata, nada mejor que retroceder a 1984, cuando Shechtman, Blech, Gratias y Cahn anunciaron, véase [38], el descubrimiento de una fase metálica cuyo espectro de difracción exhibía una simetría icosaédrica, incompatible con una simetría traslacional de la estructura. Era el nacimiento de los *cuasicristales*, estructuras cuya existencia, por otra parte, ya había sido predicha desde un punto de vista matemático, por ejemplo por Meyer [25]. La existencia de estos nuevos habitantes del mundo del estado sólido ha hecho cambiar las definiciones clásicas; así, por ejemplo, la Unión Cristalográfica Internacional describe actualmente un cristal como aquel sólido que tiene un diagrama de difracción esencialmente discreto. Ya no se pone el énfasis en las características de la estructura (simetrías, periodicidad, etc) sino en las de la imagen por difracción. De hecho la simetría del cristal es ahora la que impliquen los diagramas de difracción. El libro de Senechal [37] es una excelente referencia para revisar estas cuestiones.

1.3. El problema de la fase

Como ya comentamos anteriormente, el problema básico que nos encontramos al analizar los cristales mediante experimentos de difracción de rayos X es lo que llamábamos problema de la fase: ¿podemos recuperar la densidad electrónica ρ del cristal si sólo conocemos el módulo de sus factores de estructura —sus coeficientes de Fourier—, como ocurre en el experimento? Hay varias cuestiones que se pueden formular al respecto:

1. ¿Es éste un problema mal propuesto?, es decir, ¿existen estructuras distintas que dan lugar al mismo patrón de difracción?
2. Si las hay, ¿podemos caracterizarlas de alguna manera?
3. Queríamos encontrar ejemplos en los que algunas hipótesis extra nos permitieran reconstruir de manera única la función.
4. ¿Qué métodos se utilizan en Cristalografía para solucionar este problema?

En las próximas secciones intentaremos dar respuesta a algunas de estas cuestiones.

1.3.1. Función de Patterson. Conjuntos homométricos

La primera referencia acerca de un problema de no-unicidad en la Cristalografía de rayos X se remonta al estudio de Pauling y Shappell (véase [28]) de la estructura de la bixbita, un compuesto de Mn_2O_3 y Fe_2O_3 en el que dos posibles disposiciones atómicas concordaban con los datos del espectro de difracción; y en el que sólo otras consideraciones de tipo químico permitieron decidir cuál de las dos se correspondía con la estructura real.

No es difícil obtener ejemplos de estructuras equivalentes por difracción de rayos X. Consideremos el caso de un cristal unidimensional. Supongamos que la celda unidad es el intervalo $[0, 1)$ y que los átomos están situados en los puntos $\frac{j}{N}$, $0 \leq j \leq N-1$, para cierto N . La densidad electrónica sería

$$\mu(x) = \sum_{j=0}^{N-1} a_j \sum_{n=-\infty}^{\infty} \delta_{\frac{j}{N}+n}(x),$$

donde los $\{a_j\}$ son enteros (algunos de ellos, posiblemente cero) que representan los pesos atómicos. Asociada a esta distribución —que escribiremos $\sum_{j=0}^{N-1} a_j \delta_{j/N}$ a partir de ahora— podemos definir la estructura reflejada

$$\mu^* = \sum_{j=0}^{N-1} a_j \delta_{-j/N}.$$

Nótese que todas las operaciones indicadas se hacen módulo N (hay una estructura de grupo \mathbb{Z}_N subyacente). Sus transformadas de Fourier serán

$$\begin{aligned} \widehat{\mu}(n) &= \sum_{j=0}^{N-1} a_j e^{2\pi i \frac{nj}{N}}, \\ \widehat{\mu^*}(n) &= \sum_{j=0}^{N-1} a_j e^{-2\pi i \frac{nj}{N}} = \overline{\widehat{\mu}(n)}. \end{aligned}$$

Si formamos la *función de Patterson*, $\mu * \mu^*$, observamos que sus coeficientes de Fourier son

$$\widehat{(\mu * \mu^*)}(n) = |\widehat{\mu}(n)|^2.$$

Por tanto, el conocimiento del patrón de difracción de la densidad electrónica (*i.e.*, los módulos de los coeficientes de Fourier) determina completamente, mediante una transformación de Fourier inversa, la función de Patterson. Dos conjuntos se dirán *homométricos* si tienen el mismo patrón de difracción:

$$\mu, \nu \text{ homométricos} \Rightarrow |\widehat{\mu}(n)| = |\widehat{\nu}(n)|, \quad \forall n \in \mathbb{Z}.$$

O, equivalentemente, si tienen la misma función de Patterson,

$$\mu * \mu^* = \nu * \nu^*.$$

El nombre de conjuntos homométricos tiene su origen en el caso en que los $\{a_j\}$ toman valores 0 o 1 (serían los conjuntos ciclotómicos que consideró Patterson, uno de los patriarcas del estudio del problema de la fase, véanse [29, 30, 31]). En este caso, dos distribuciones con el mismo patrón de difracción tienen el mismo conjunto de distancias interatómicas (contando multiplicidades). Es conveniente utilizar una notación polinómica

$$\begin{aligned}\mu &= \sum_{j=0}^{N-1} a_j \delta_{j/N} \longleftrightarrow P(x) = \sum_{j=0}^{n-1} a_j x^j, \\ \mu^* &= \sum_{j=0}^{N-1} a_j \delta_{-j/N} \longleftrightarrow P^*(x) = P\left(\frac{1}{x}\right),\end{aligned}$$

de forma que $\hat{\mu}(n) = P(e^{2\pi i n/N})$. Una receta para construir conjuntos homométricos es la siguiente: tómense dos polinomios $A(x)$ y $B(x)$ y fórmense

$$\begin{aligned}P_1(x) &= A(x)B(x), \\ P_2(x) &= x^s A(x)B^*(x),\end{aligned}$$

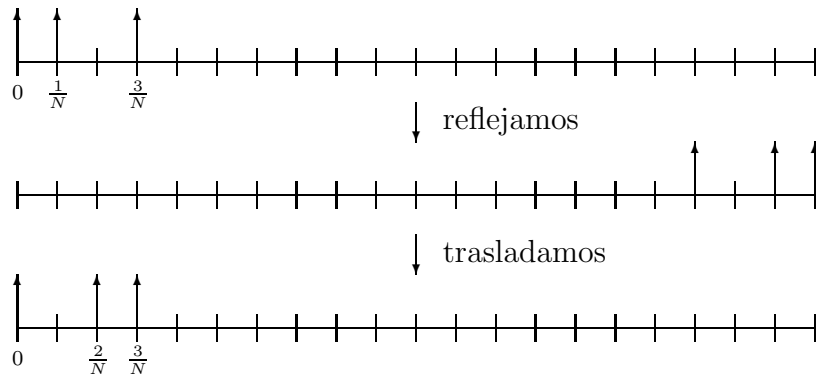
donde s es un entero. Los polinomios P_1 y P_2 representan entonces distribuciones homométricas. Veremos posteriormente que, esencialmente, todos los conjuntos homométricos se pueden construir de esta manera. Un ejemplo de este tipo de construcción es el siguiente, debido a Calderón y Pepinsky ([7]). Sean los polinomios

$$\begin{aligned}P_1(x) &= (x^3 + x + 1)(x^9 + x^4 + 1) \\ &= x^{12} + x^{10} + x^9 + x^7 + x^5 + x^4 + x^3 + x + 1, \\ P_2(x) &= (x^3 + x^2 + 1)(x^9 + x^4 + 1) \\ &= x^{12} + x^{11} + x^9 + x^7 + x^6 + x^4 + x^3 + x^2 + 1.\end{aligned}$$

Es sencillo comprobar que

$$P_1(x)P_1\left(\frac{1}{x}\right) = P_2(x)P_2\left(\frac{1}{x}\right),$$

y que si consideramos los conjuntos de diferencias entre los exponentes con coeficientes no nulos, obtenemos los mismos valores (con las mismas multiplicidades). Estos conjuntos son homométricos en \mathbb{Z} o en \mathbb{Z}_N , con $N > 12$; y constituyen un ejemplo del caso en que los polinomios tienen un factor común y otro que se obtiene por un proceso de “reflejar” los coeficientes.



En una serie de trabajos, J. Rosenblatt ha conseguido dar una caracterización de los posibles conjuntos homométricos en el caso general de un grupo G abeliano. Una distribución finita D en G será de la forma

$$\sum_{g \in G} a_g \delta_g,$$

donde $a_g \in \mathbb{C}$ y $a_g \neq 0$ sólo un número finito de veces. El álgebra de estas distribuciones bajo el producto de convolución es isomorfo al anillo de grupo $\mathbb{C}[G]$. La reflexión D^* de una distribución $D = \sum_g a_g \delta_g$ se define como $D^* = \sum \overline{a_g} \delta_{-g}$. Si designamos por Γ el grupo de los caracteres de G , la transformada de Fourier de $D \in \mathbb{C}[G]$ se define como

$$\widehat{D}(\gamma) = \sum a_g \overline{\gamma(g)}, \quad \forall \gamma \in \Gamma.$$

Es fácil ver que

$$\left. \begin{aligned} \widehat{D^*}(\gamma) &= \overline{\widehat{D}(\gamma)} \\ (\widehat{D_1 * D_2})(\gamma) &= \widehat{D_1}(\gamma) \widehat{D_2}(\gamma) \end{aligned} \right\} \quad \forall \gamma \in \Gamma.$$

Por tanto,

$$\text{si } D * D^* = E * E^* \implies \left| \widehat{D}(\gamma) \right| = \left| \widehat{E}(\gamma) \right|, \quad \forall \gamma \in \Gamma.$$

Pero el recíproco también es cierto, porque si $A \in \mathbb{C}[G]$ y $\widehat{A}(\gamma) = 0, \forall \gamma \in \Gamma$, entonces $A = 0$.

Dependiendo del grupo G del que se trate, distintas caracterizaciones pueden darse. Por ejemplo, en [34] se trata el caso de $G = \mathbb{R}^n$. En [32] se caracteriza el caso que nos interesa, cuando $G = \mathbb{Z}_n$. Por ejemplo, se tiene el siguiente teorema:

Teorema (Rosenblatt). Si $D, E \in K[\mathbb{Z}_n]$, entonces D y E son homométricos si y sólo si existen $\varepsilon_1, \varepsilon_2 \in \{1, -1\}$, $g_1, g_2 \in \mathbb{Z}_n$ y $A, B \in K[\mathbb{Z}_n]$ tales que

$$\begin{aligned} D &= \varepsilon_1 \delta_{g_1} * A * B, \\ E &= \varepsilon_2 \delta_{g_2} * A * B^*. \end{aligned}$$

Aquí, K es un anillo $\mathbb{Z} \subset K \subset \mathbb{C}$ cerrado por conjugación compleja, de forma $K[G]$ es un dominio de factorización única. En este sentido, puede ser interesante comentar los trabajos de Odlyzco y Poonen [27], en los que se estudia el comportamiento de los ceros de polinomios con coeficientes 0 y 1. Si consideramos

$$P = \left\{ f(z) : f(z) = 1 + \sum_{j=1}^d a_j z^j, \quad a_j = 0 \text{ o } 1 \text{ para todo } j \right\}$$

y definimos

$$W = \{z \in \mathbb{C} : f(z) = 0 \text{ para alguna } f \in P\},$$

se puede mostrar que las cotas que se obtengan sobre W pueden interpretarse en términos de la irreducibilidad de los polinomios de P . Por ejemplo, en [6] se prueba que $\operatorname{Re}(z) < 3/2$, para todo $z \in W$, y que si $f(2)$ es primo para algún $f(z) \in P$, entonces f es irreducible sobre los racionales. La conjetura reza que casi todos los polinomios $f(z) \in P$ son irreducibles, pero esto es todavía un problema abierto. Nótese que si el polinomio es irreducible, se corresponderá con una distribución de reconstrucción única.

En [33], Rosenblatt estudia el caso de distribuciones más generales.

En otra dirección, podemos destacar el resultado de Grünbaum y Moore (véase [19]). Consideremos un modelo unidimensional de átomos con peso atómico a_j (de nuevo enteros, posiblemente 0) situados en los puntos j/N , $0 \leq j \leq N-1$. Si denotamos por $F(k)$ el coeficiente de Fourier de la estructura en la dirección k , el patrón de difracción nos proporciona información de los llamados invariantes de segundo orden, los productos

$$F(k)F(-k).$$

Pero podríamos considerar invariantes de mayor orden, productos de la forma

$$F(k_1) \cdots F(k_r) \quad \text{tales que } k_1 + \cdots + k_r \equiv 0 \pmod{N}.$$

En el trabajo citado se prueba que el conocimiento de los invariantes hasta sexto orden determina de forma única la estructura. Sin embargo, no está claro cómo obtener la información sobre los invariantes de orden mayor a partir de datos experimentales, lo que dificulta la aplicación de este resultado a la resolución del problema de la fase.

Consideremos otro problema diferente: dada una malla $N \times N$ de \mathbb{R}^2 , ¿cuántos puntos podemos colocar en ella de manera que no haya dos vectores diferencia iguales? Podemos probar el siguiente resultado:

Teorema 1 *Sea A un conjunto de puntos con esa propiedad, esto es,*

$$A = \{ \vec{v} \in ([1, N] \times [1, N]) \cap \mathbb{Z}^2 \mid \text{si } \vec{v}_1 - \vec{v}_2 = \vec{v}_3 - \vec{v}_4, \\ \text{entonces } \vec{v}_1 = \vec{v}_3 \text{ y } \vec{v}_2 = \vec{v}_4 \text{ o bien } \vec{v}_1 = \vec{v}_2 \text{ y } \vec{v}_3 = \vec{v}_4 \}.$$

Entonces, $\#A \leq C N$

Prueba. Démonos un conjunto A con esa propiedad y consideremos la función f , 1-periódica en cada variable, definida por

$$f(\vec{x}) = \sum_{\vec{v} \in A} e^{2\pi i \vec{v} \cdot \vec{x}}.$$

Evaluemos su norma L^4 :

$$\begin{aligned}
\|f\|_{L^4(T^2)}^4 &= \int_0^1 \int_0^1 \left| \sum_{\vec{v} \in A} e^{2\pi i \vec{v} \cdot \vec{x}} \right|^4 dx dy \\
&= \sum_{\vec{v}_1, \vec{v}_2, \vec{v}_3, \vec{v}_4 \in A} \int_0^1 \int_0^1 e^{2\pi i (\vec{v}_1 + \vec{v}_2 - \vec{v}_3 - \vec{v}_4) \cdot \vec{x}} dx dy \\
&= \sum_{\substack{\vec{v}_1, \vec{v}_2 \in A \\ \vec{v}_1 \neq \vec{v}_2}} \underbrace{\sum_{\substack{\vec{v}_3, \vec{v}_4 \in A \\ \vec{v}_1 + \vec{v}_2 = \vec{v}_3 + \vec{v}_4}} 1}_2 + \sum_{\vec{v} \in A} \underbrace{\sum_{\substack{\vec{v}_3, \vec{v}_4 \in A \\ 2\vec{v} = \vec{v}_3 + \vec{v}_4}} 1}_1 \\
&= 2(\#A)^2 - \#A.
\end{aligned}$$

Con los mismos argumentos, es fácil ver que si tenemos una función

$$g(\vec{x}) = \sum_{\vec{v} \in A} a_{\vec{v}} e^{2\pi i \vec{v} \cdot \vec{x}},$$

entonces

$$\|g\|_4^4 = \sum_{\substack{\vec{v}_1, \vec{v}_2, \vec{v}_3, \vec{v}_4 \in A \\ \vec{v}_1 + \vec{v}_2 - \vec{v}_3 - \vec{v}_4 = \vec{0}}} a_{\vec{v}_1} a_{\vec{v}_2} \bar{a}_{\vec{v}_3} \bar{a}_{\vec{v}_4} = 2 \left(\sum_{\vec{v} \in A} |a_{\vec{v}}|^2 \right)^2 - \sum_{\vec{v} \in A} |a_{\vec{v}}|^4.$$

Consideramos el operador T_A

$$T_A : \quad \varphi \longmapsto T_A(\varphi) = \sum_{\vec{v} \in A} \widehat{\varphi}(\vec{v}) e^{2\pi i \vec{v} \cdot \vec{x}},$$

donde $\widehat{\varphi}(\vec{v})$ son los coeficientes de Fourier de φ , $\varphi(\vec{x}) \sim \sum \widehat{\varphi}(\vec{v}) e^{2\pi i \vec{v} \cdot \vec{x}}$. El operador T_A es un multiplicador $L^2 \longmapsto L^4$, porque

$$\|T_A(\varphi)\|_4^4 = 2 \left(\sum_{\vec{v} \in A} |\widehat{\varphi}(\vec{v})|^2 \right)^2 - \sum_{\vec{v} \in A} |\widehat{\varphi}(\vec{v})|^4 \leq 2 \left(\sum_{\vec{v} \in \mathbb{Z}^2} |\widehat{\varphi}(\vec{v})|^2 \right)^2 = 2\|\varphi\|_2^4.$$

Por dualidad, T_A será un operador acotado de $L^{4/3}$ en L^2 . Consideremos entonces la función ψ ,

$$\psi(\vec{x}) = \sum_{\nu_1 = -N}^N \sum_{\nu_2 = -N}^N e^{2\pi i (\nu_1 x + \nu_2 y)}.$$

Utilizando estimaciones conocidas del núcleo de Dirichlet, véase la página 41 para los detalles, podemos evaluar

$$\|\psi\|_{4/3} = \|D_N\|_{4/3}^2 \leq N^{1/2}.$$

La actuación del operador T_A sobre esta función ψ es

$$T_A\psi(\vec{x}) = \sum_{\vec{\nu} \in A} e^{2\pi i \vec{\nu} \cdot \vec{x}},$$

así que podemos terminar:

$$\begin{aligned} \|T_A\psi\|_2 &= \left\| \sum_{\vec{\nu} \in A} e^{2\pi i \vec{\nu} \cdot \vec{x}} \right\|_2 = 2(\#A)^2 - \#A \geq (\#A)^2 \\ \|T_A\psi\|_2 &\leq C\|\psi\|_{4/3} \leq CN^{1/2}; \end{aligned}$$

es decir,

$$\#A \leq CN.$$

■

Para interpretar este resultado en términos del problema de la fase, observemos que si situamos un conjunto de átomos —deltas de Dirac— iguales de forma que no haya dos vectores interatómicos iguales, podremos recuperar la estructura de manera única si conocemos la función de Patterson (recorremos que en el caso de deltas de Dirac iguales, el conocimiento de los módulos de los coeficientes de Fourier equivale al de los vectores diferencia).

Por supuesto, estimaciones semejantes pueden obtenerse para el problema en dimensión n ($\#A \leq CN^{n/2}$). Pero en 2 dimensiones el problema tiene, además, una interpretación geométrica bonita: estos conjuntos son tales que no podemos dibujar un paralelogramo usando sus puntos como vértices.

¿Y cómo podríamos elegir exactamente N puntos de forma que no obtenamos vectores diferencia iguales? Si N es primo, una receta sería tomar

$$\vec{\nu}_m = (m, m^2 \pmod{N}), \quad \text{para } 0 \leq m \leq N-1.$$

Si existieran $0 \leq n, m \leq N-1$ y $0 \leq n', m' \leq N-1$, que podemos suponer distintos entre sí, $m \neq n$ y $m' \neq n'$, tales que dan lugar a vectores diferencia iguales,

$$\vec{\nu}_m - \vec{\nu}_n = \vec{\nu}_{m'} - \vec{\nu}_{n'},$$

debería cumplirse que

$$\begin{cases} m - n &= m' - n' \\ m^2 - n^2 &= m'^2 - n'^2 \pmod{N}. \end{cases}$$

Y, como N es primo, esto exige que $m = m'$ y $n = n'$. Por supuesto, si N no es primo, siempre podemos encontrar un primo menor y cercano. En torno a este problema, Cilleruelo y Trujillo han probado que se puede obtener la constante uno en la estimación.

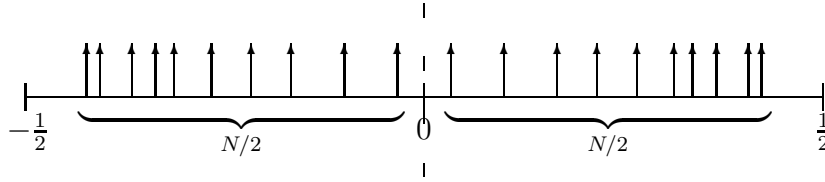
Teorema (J. Cilleruelo-C. Trujillo). *Sean $\nu_1, \dots, \nu_r \in [1, N] \times [1, N]$ tales que si $\nu_i + \nu_j = \nu_k + \nu_l$, entonces, o bien $i = k$, o bien $i = l$. En estas condiciones, $r \leq N$.*

La prueba utiliza técnicas distintas a las descritas anteriormente.

1.3.2. Algunos ejemplos de recuperación de la fase

Veremos a continuación una serie de ejemplos sencillos en los que el conocimiento de algún tipo de información extra, generalmente de tipo geométrico, nos permite recuperar la estructura a partir del patrón de difracción.

Empecemos considerando el caso de un cristal unidimensional centrosimétrico, en cuya celda unidad (que describiremos con el intervalo $(-\frac{1}{2}, \frac{1}{2}]$) tenemos N átomos iguales (de ellos, $N/2$ estarán relacionados con los otros $N/2$ por una reflexión respecto al centro de simetría).



Podemos representar una tal distribución atómica por

$$\mu(x) = \sum_{j=1}^N \delta_{x_j}(x),$$

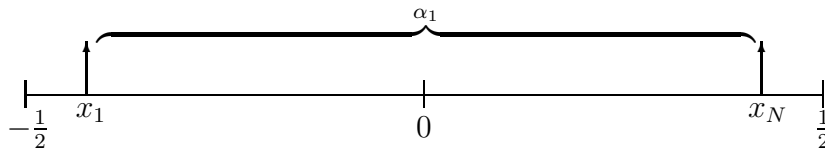
donde hemos numerado los átomos, por ejemplo, de izquierda a derecha; así, las posiciones x_j y x_{N-j+1} están relacionadas por la simetría. Sus coeficientes de Fourier serán

$$\hat{\mu}(n) = \sum_{j=1}^N e^{2\pi i n x_j} = 2 \sum_{j=1}^{N/2} \cos(2\pi n x_j).$$

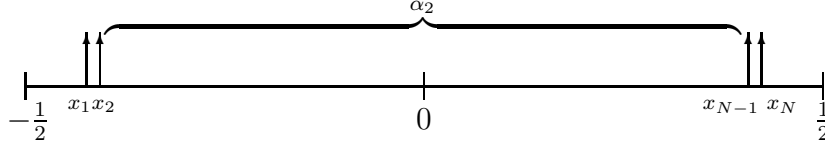
El patrón de difracción de la estructura nos da la información sobre los módulos de estos números (nótese que, por la simetría del problema, todos los coeficientes son reales, la fase que perdemos en el proceso es simplemente un signo). Los picos de la función de Patterson

$$\mu * \mu^*(x) = \sum_{n=-\infty}^{\infty} |\hat{\mu}(n)|^2 e^{-2\pi i n x} = \sum_{n=-\infty}^{\infty} \sum_{j,k=1}^N e^{-2\pi i n (x - x_j + x_k)}$$

nos dan la lista de distancias interatómicas (con sus multiplicidades). Supongamos entonces que conocemos esta lista; ¿cómo podemos recuperar la estructura? Localizamos la mayor de estas distancias, llamémosla α_1 . Es obvio que esto fija la posición de los átomos más alejados del centro de simetría:



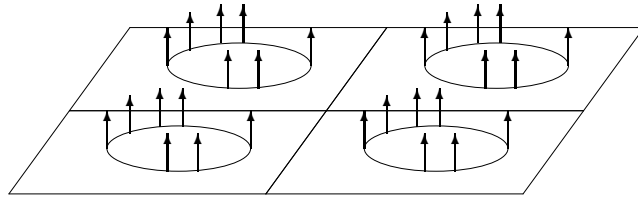
La siguiente distancia interatómica, α_2 , corresponderá a la distancia entre x_2 y x_N (o la equivalente por simetría; esta frecuencia llevará coeficiente doble del anterior), y fijará por tanto los puntos x_2 y x_{N-1} :



Nótese que, por tener un centro de simetría, el conocimiento de α_2 fija la posición de los átomos correspondientes. Piénsese en qué sucedería si no tuviéramos la certeza de que en esas posiciones hubiera dos átomos: si no fuera centrosimétrico, podría haber un sólo átomo en cualquiera de las dos posiciones, x_2 y x_{N-1} , lo que daría lugar a una ambigüedad en la determinación de la estructura.

El siguiente paso sería eliminar de la lista de distancias aquellas correspondientes a las posiciones ya fijadas (en este caso, la distancia entre x_1 y x_2). Una vez hecho esto, procederíamos a localizar α_3 y a fijar el siguiente par de puntos. Es claro que este procedimiento permite fijar la posición de la pareja k si tenemos fijadas las posiciones de las $k - 1$ parejas anteriores.

Consideremos otro ejemplo, el cristal bidimensional siguiente:



formado por “moléculas” constituidas por N átomos iguales situados en una circunferencia. Podremos describir la celda unidad por

$$F(\vec{x}) = \sum_{j=1}^N \delta_{\vec{x}_j}(\vec{x}) \quad \text{con } \vec{x}_j \in \text{circunferencia.}$$

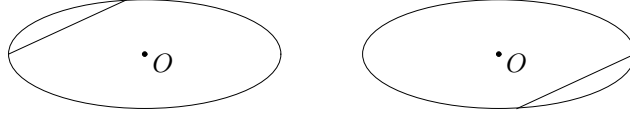
Supongamos que, a través del espectro de difracción, conocemos, para cada par $(n_1, n_2) \in \mathbb{Z}^2$, los módulos de sus coeficientes de Fourier

$$|\hat{F}(n_1, n_2)|^2 = \sum_{j=1}^N \sum_{k=1}^N e^{2\pi i [n_1(x_k - x_j) + n_2(y_k - y_j)]}.$$

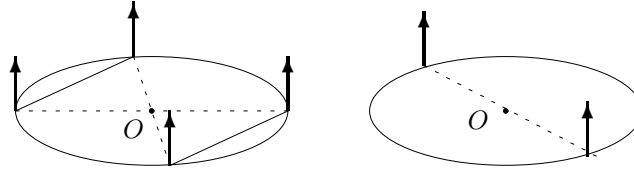
Para obtener las distancias interatómicas, fijamos $\alpha, \beta \in \mathbb{R}$ y evaluamos

$$\begin{aligned} & \frac{1}{(2M+1)^2} \sum_{n_1, n_2 = -M}^M \left| \hat{F}(n_1, n_2) \right|^2 e^{-2\pi i (n_1 \alpha + n_2 \beta)} \\ &= \sum_{j,k=1}^N \frac{1}{(2M+1)^2} \sum_{n_1, n_2 = -M}^M e^{-2\pi i [n_1(\alpha - x_k + x_j) + n_2(\beta - y_k + y_j)]}. \end{aligned}$$

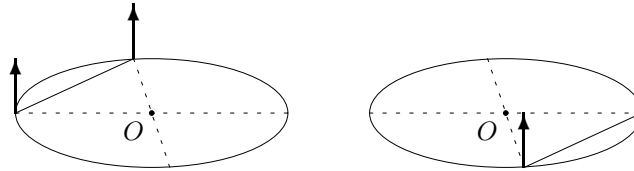
En el límite $M \rightarrow \infty$, obtenemos $\begin{cases} 0, & \text{si } (\alpha, \beta) \neq (x_k - x_j, y_k - y_j) \\ m_{k,j}, & \text{si } (\alpha, \beta) = (x_k - x_j, y_k - y_j), \end{cases}$ donde $m_{k,j}$ es la multiplicidad con la que aparece la frecuencia $(x_k - x_j, y_k - y_j)$. Variando (α, β) podemos obtener todo el conjunto de vectores diferencia $\vec{v}_{k,j} = (x_k - x_j, y_k - y_j)$. Los extremos de cada vector están sobre la circunferencia, así que cada uno de ellos determina una cuerda en ésta. Pero, en una circunferencia, una cuerda sólo puede estar en dos posiciones!:



Es decir, cada cuerda $v_{k,j}$ sólo puede aparecer una o dos veces. Si un $v_{k,j}$ aparece dos veces, quedan determinadas las posiciones de cuatro átomos en la circunferencia; o si la tal cuerda es un diámetro, quedan determinadas dos posiciones:



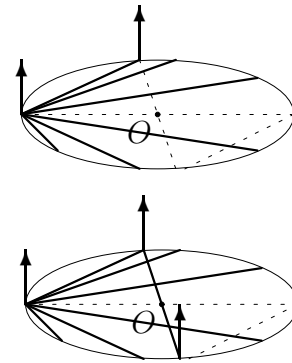
El único problema a la hora de determinar la estructura es cuando una cuerda aparece una sola vez; en este caso, puede estar en dos posiciones:



Salvo esta ambigüedad –la simetría respecto al centro de la circunferencia– podemos determinar el resto de la estructura. Basta con determinar un átomo que no tenga un equivalente por simetría.

Así, por ejemplo, si ninguno de los diámetros está en nuestra lista de frecuencias, cualquiera de los dos puntos sirve para este propósito: basta buscar las $N - 2$ cuerdas que parten de uno de los dos puntos hacia el resto de los átomos (nótese que todas ellas deben aparecer una sola vez).

Si está uno de los diámetros, tomamos el punto que no tiene simétrico y de nuevo determinamos la estructura.



Veamos ahora otro tipo de ejemplos, en los que información sobre el comportamiento asintótico de los coeficientes de Fourier nos ayuda a determinar la estructura del cristal. El modelo que consideraremos es el de un cristal unidimensional; la densidad electrónica en la celda unidad (que supondremos que

es el intervalo $(0, 1]$) vendrá dada por una medida de probabilidad μ . En [18] se recoge el siguiente lema como corolario de un resultado más general:

Lema (Lax-Varadhan, Escobedo). *Toda medida de probabilidad μ en el toro tal que*

$$\lim_{|n| \rightarrow \infty} |\widehat{\mu}(n)| = 1$$

es una delta de Dirac.

En la referencia antes citada se recoge una prueba de este hecho. Nosotros daremos una prueba distinta, que nos servirá para obtener un resultado algo más general. Toda medida de probabilidad se puede descomponer en una parte discreta y una continua,

$$\mu = \mu_d + \mu_c,$$

donde la parte discreta es una suma de deltas de Dirac,

$$\mu_d = \sum_j a_j \delta_{x_j},$$

con $a_j > 0$ y $\sum a_j \leq 1$, por ser una medida de probabilidad. Recordemos ahora un teorema de Wiener, que reza así:

$$\sum_{\tau \in \mathbb{R}} \nu(\{\tau\})^2 = \lim_{N \rightarrow \infty} \left\{ \frac{1}{2N+1} \sum_{n=-N}^N |\widehat{\nu}(n)|^2 \right\},$$

para toda medida ν . La prueba de este resultado se basa en la descomposición de la medida señalada arriba, en definir una medida asociada $\widetilde{\nu}$ mediante

$$\widetilde{\nu}(E) = \overline{\nu}(-E), \quad \forall E \text{ Borel de } \mathbf{T}$$

y en construir lo que sería la función de Patterson asociada, $\nu * \widetilde{\nu}$. Apliquemos el resultado de Wiener a nuestra medida μ ,

$$\sum_{\tau \in \mathbb{R}} \mu(\{\tau\})^2 = \lim_{N \rightarrow \infty} \left\{ \frac{1}{2N+1} \sum_{n=-N}^N |\widehat{\mu}(n)|^2 \right\},$$

y observemos que en la suma de la izquierda sólo la parte discreta contribuye; y que el límite de la derecha vale 1, por ser las medias aritméticas de los $|\widehat{\mu}(n)|^2$. Por tanto, obtenemos que

$$\sum_j a_j^2 = 1.$$

Pero como los $a_j \leq 1$, se tiene que $\sum a_j^2 \leq \sum a_j$, con lo que deducimos que

$$\sum_j a_j = 1$$

y que, por tanto, la medida sólo consta de parte discreta. Pero aún más,

$$\left. \begin{array}{l} \sum a_j = 1 \\ \sum a_j^2 = 1 \end{array} \right\} \Rightarrow \sum_j \left(\underbrace{a_j - a_j^2} \right) = 0.$$

Los sumandos señalados con la llave son estrictamente positivos a menos que $a_j = a_j^2$, es decir, que $a_j = 0, 1$. En consecuencia, existirá j_0 tal que $a_{j_0} = 1$, y el resto de los a_j serán nulos. Con lo que queda probado el lema.

Podemos obtener otro resultado concerniente a la “detección” de deltas de Dirac:

Lema 1 *Sea μ una medida de probabilidad en \mathbf{T} , y supongamos que existe un cierto primo p tal que se verifica que*

$$\lim_{|m| \rightarrow \infty} |\widehat{\mu}(mp)| = 1 \quad y \quad \lim_{|k| \rightarrow \infty} |\widehat{\mu}(k)| = A \neq 1 \quad \text{si } (k, p) = 1.$$

Entonces, la medida μ es puramente discreta,

$$\mu = \sum_j a_j \delta_{x_j},$$

con $0 < a_j < 1$, $\sum a_j = 1$ y los x_j son, salvo traslaciones, de la forma $\frac{n_j}{p}$, donde los n_j son enteros, $0 \leq n_j \leq p - 1$.

Prueba. Es fácil ver que si hacemos de nuevo la descomposición de la medida en partes continua μ_c y discreta μ_d , los coeficientes de Fourier-Stiltjes de ésta última satisfacen los mismos comportamientos asintóticos que los de la medida μ . Si definimos la medida $\tilde{\mu}$ a través de $\tilde{\mu}(E) = \overline{\mu(-E)}$, para todo E Borel del toro, se cumplirá que

$$\overline{\widehat{\mu}(n)} = \widehat{\tilde{\mu}}(n) \quad \forall n,$$

y podremos evaluar

$$\begin{aligned} \frac{1}{2M+1} \sum_{n=-M}^M |\widehat{\mu}(np)|^2 &= \frac{1}{2M+1} \sum_{n=-M}^M \widehat{\mu}(np) \overline{\widehat{\mu}(np)} \\ &= \frac{1}{2M+1} \sum_{n=-M}^M \widehat{\mu}(np) \widehat{\tilde{\mu}}(np) = \frac{1}{2M+1} \sum_{n=-M}^M (\widehat{\mu * \tilde{\mu}})(np) \\ &= \int_0^1 \frac{1}{2M+1} \sum_{n=-M}^M e^{2\pi i x p n} d(\mu * \tilde{\mu})(x). \end{aligned}$$

Si ahora evaluamos el límite $M \rightarrow \infty$ y aplicamos el teorema de la convergencia dominada de Lebesgue, obtenemos

$$\begin{aligned}
1 &= \int_0^1 \lim_{M \rightarrow \infty} \frac{1}{2M+1} \sum_{n=-M}^M e^{2\pi i x p n} d(\mu * \tilde{\mu})(x) \\
&= \sum_{l=0}^{p-1} (\mu * \tilde{\mu})(\{l/p\}) = \sum_{l=0}^{p-1} (\mu_d * \tilde{\mu}_d)(\{l/p\}) \\
&= \sum_{l=0}^{p-1} \sum_{j,k} a_j a_k (\delta_{x_j} * \delta_{-x_k})(\{l/p\}) = \sum_{l=0}^{p-1} \sum_{j,k} a_j a_k \delta_{x_j - x_k}(\{l/p\}) \\
&= \sum_j a_j^2 + \sum_{j \neq k} a_j a_k \underbrace{\sum_{l=0}^{p-1} \delta_{x_j - x_k}(\{l/p\})}_{\text{para cada } j, k, \text{ esto vale } 0 \text{ o } 1} \\
&\leq \sum_j a_j^2 + \sum_{j \neq k} a_j a_k = \left(\sum_j a_j \right)^2.
\end{aligned}$$

Pero como $\sum a_j \leq 1$, el último término es también menor o igual que 1. Por tanto, debe cumplirse que

$$\left(\sum_j a_j \right)^2 = 1 \implies \sum_j a_j = 1,$$

es decir, que no hay parte continua. Pero aún más, cada una de las sumas $\sum_{l=0}^{p-1} \delta_{x_j - x_k}(\{l/p\})$ debe valer 1, así que

$$\forall j, k \quad x_j - x_k = \frac{\nu_{jk}}{p},$$

con ν_{jk} un entero entre 0 y $p-1$. Como habrá invariancia por traslaciones, podemos suponer que, por ejemplo, $x_0 = 0$ y que, por tanto,

$$x_j = \frac{n_j}{p} \quad \text{con } n_j \text{ enteros entre } 1 \text{ y } p-1$$

Podemos acabar mostrando que los módulos de los coeficientes de Fourier no son sólo 1 o A en el límite, sino que todos ellos tienen esos valores:

$$|\hat{\mu}(np)| = \left| \sum_j a_j e^{2\pi i p n n_j / p} \right| = \sum_j a_j = 1 \quad \forall n.$$

Y si llamamos $\mathcal{A} = \mathbb{Z} \setminus \{np\}_{n=-\infty}^{\infty}$, es fácil comprobar que la sucesión de módulos $\{|\hat{\mu}(k)|\}_{k \in \mathcal{A}}$ es periódica, de periodo p . Y como en el límite vale A , se debe cumplir que

$$|\hat{\mu}(k)| = A \quad \text{siempre que } (k, p) = 1$$

■

En este punto, podemos enlazar con otro resultado de recuperación de la fase. Si los coeficientes a_j fueran racionales, estaríamos en las hipótesis del siguiente teorema, cf. [15]:

Teorema (Córdoba, Chamizo). *Consideremos el siguiente modelo para la densidad electrónica de un cristal unidimensional,*

$$\rho(x) = \sum_{j=1}^N b_j \sum_{n=-\infty}^{\infty} \delta_{x_j+n},$$

donde los b_j son enteros positivos y $0 \leq x_j < 1$. Supongamos que existe un primo p de forma que la suma

$$S(m) = \sum_{j=1}^N b_j e^{2\pi i m x_j}$$

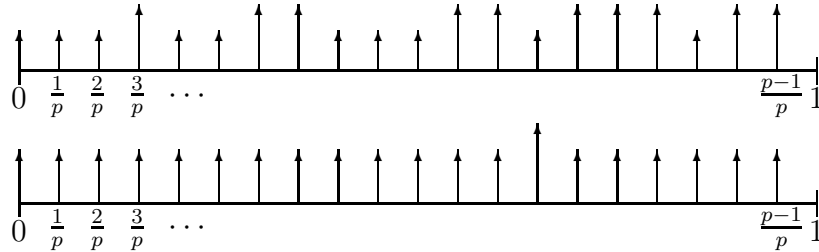
tiene un módulo constante $|S(m)| = \Gamma$ si p no es un divisor de m y $|S(m)| = \sum b_j$ si sí lo es. Entonces $p x_j \in \mathbb{Z}$, $1 \leq j \leq N$, y se tienen dos posibilidades:

$$S(m) = AT(m) + Be^{2\pi i \frac{mk}{p}} G(m), \quad \text{o bien} \quad S(m) = AT(m) + Be^{2\pi i \frac{mk}{p}},$$

donde $A, B, k \in \mathbb{Z}$ y

$$T(m) = \sum_{n=0}^{p-1} e^{2\pi i \frac{mn}{p}}, \quad G(m) = \sum_{n=1}^{p-1} \left(\frac{m}{p} \right) e^{2\pi i \frac{mn}{p}}.$$

Hemos utilizado la notación habitual $\left(\frac{m}{p} \right)$, con p primo, para describir el símbolo de Legendre, que vale 1 si n es un residuo cuadrático módulo p , y -1 si no lo es (véase la subsección 2.2.1 para más detalles). Lo que este resultado nos dice es que en las condiciones arriba escritas, la molécula es, salvo transformaciones triviales como traslaciones o reflexiones, como los siguientes esquemas indican:



La propiedad de estas estructuras “gaussianas” de producir un espectro de difracción con dos intensidades distintas, una en una dirección y otra en el resto, tiene otra serie de aplicaciones. Por ejemplo, en [39] se puede ver su aplicación a algo en principio muy diferente, como es el diseño de techos de auditorios.

1.3.3. Métodos de resolución del problema de la fase

Hemos visto ya que el problema de la fase es, desde un punto de vista matemático, un problema mal propuesto: existen estructuras distintas (o no equivalentes por transformaciones triviales) que son indistinguibles por difracción de rayos X. Sin embargo, desde los tiempos de los Bragg, se han ido resolviendo numerosas estructuras cristalinas. ¿Cuál es la razón que explica tal éxito? Es fácil darse cuenta de por qué no todas las combinaciones de fases son igualmente aceptables: un químico podría establecer la diferencia entre unas “buenas” fases, que producen una densidad electrónica concentrada en torno a unos átomos, con distancias interatómicas razonables, de unas “malas” fases, que producen mapas electrónicos sin sentido químico. Pero este criterio de *validez química* es muy difícil de traducir a condiciones matemáticas que permitan evaluar la bondad de las distintas combinaciones de fases.

Distinguiremos dos formas fundamentales de abordar el problema de la reconstrucción: los métodos basados en la función de Patterson y los llamados métodos directos; aunque en realidad ninguno de ellos garantiza la reconstrucción óptima de la estructura, y generalmente se utilizan en combinación con otros procedimientos de refinamiento de tipo estadístico que no mencionaremos. Los primeros requieren en general el conocimiento de algún tipo de información extra (como en los ejemplos que considerábamos en la sección anterior). Un ejemplo de esto es el llamado método de los átomos pesados: si en la celda unidad hay varios átomos mucho más pesados que los demás, podremos localizar (por su intensidad) los picos que corresponden a las distancias entre ellos y, con ello, podremos determinar sus posiciones. Los segundos, los métodos directos, son aquellos que intentan obtener las fases de los factores de estructura directamente de las amplitudes observadas, a través de relaciones matemáticas. Repasemos algunos hechos transcendentales en el desarrollo de estos métodos.

En los primeros tiempos, las reconstrucciones de la estructura electrónica se basaban en el conocimiento *a priori* de cierta información química: con ella, se podían ajustar los datos experimentales a un cierto modelo químico. Un progreso importante se produjo cuando se descubrió que ciertas propiedades generales de la densidad electrónica —la *positividad* de Harker, Kasper, Karle y Hauptman, véase [20, 22], y la *atomicidad* de Sayre, [36]— implicaban relaciones entre las fases y las amplitudes de los coeficientes de Fourier; lo que permitía concebir esperanzas sobre un posible tratamiento matemático del problema.

El enfoque que ha resultado más fructífero es el estadístico: sorprendentemente, la suposición de que una estructura está constituida por átomos da lugar a indicaciones probabilísticas sobre las distintas combinaciones de fases, ¡pese a que no sepamos dónde están realmente los átomos! Una forma de ver esto es suponer que podemos generar la estructura del cristal situando los

átomos independiente y aleatoriamente en la celda unidad. Los coeficientes de Fourier correspondientes a tales estructuras son entonces sumas de muchas variables aleatorias (las contribuciones de cada átomo) y el Teorema Central del Límite puede ser invocado para obtener estimaciones de su distribución. El uso de estas ideas comenzó con los trabajos de Wilson [42]; pero fueron Hauptman y Karle [21] los primeros que examinaron la distribución conjunta de una serie de coeficientes de Fourier y observaron que tales distribuciones podían aportar información sobre las fases si los módulos se suponían conocidos. Estas aportaciones les valieron la concesión del premio Nobel de Química de 1985. Bertaut, [1, 2, 3] y Klug, [23], mostraron posteriormente que la formulación matemática de Hauptman y Karle se basaba en la teoría de los desarrollos asintóticos de Edgeworth o de Gram-Charlier.

Desde entonces los métodos directos se han desarrollado considerablemente, de forma que se ha conseguido diseñar programas de ordenador capaces de resolver estructuras que contienen hasta 100 átomos; pero que tienen grandes dificultades cuando las moléculas son mayores. En [5], Bricogne describe las limitaciones que los métodos directos tradicionales tienen y propone el uso de nuevas técnicas que permiten superarlas. Pero ignoramos si estas mejoras se han visto implementadas en la práctica en los programas que se manejan en los laboratorios cristalográficos.

Empecemos obteniendo algunas desigualdades, como hacían Harker y Kasper [20]. Como la densidad electrónica debe ser positiva, podemos estimar

$$|F_{hkl}|^2 = \left| \int_V \rho(x, y, z) e^{2\pi i(hx + ky + lz)} dx dy dz \right|^2 \leq \left(\int_V \rho \right)^2 = F_{000}^2.$$

Si la estructura es centrosimétrica, los factores de estructura serán reales,

$$\begin{aligned} F_{hkl} &= \int_{-a/2}^{a/2} \int_{-b/2}^{b/2} \int_{-c/2}^{c/2} \rho(x, y, z) e^{2\pi i(hx + ky + lz)} dx dy dz \\ &= \int_0^{a/2} \int_0^{b/2} \int_0^{c/2} \rho(x, y, z) \cos(2\pi(hx + ky + lz)) dx dy dz \end{aligned}$$

y podremos aplicar la desigualdad de Cauchy para obtener otras estimaciones:

$$F_{hkl}^2 \leq \left(\int_V \rho \right) \left(\int_V \rho \cos^2(2\pi(hx + ky + lz)) \right) = F_{000} \left(\frac{1}{2} F_{000} + \frac{1}{2} F_{2h2k2l} \right).$$

En la discusión posterior, utilizaremos los llamados *factores de estructura unitarios*

$$U_{hkl} = \frac{F_{hkl}}{F_{000}},$$

que están en la escala dada por F_{000} , el contenido de la celda unidad. En términos de estas nuevas cantidades, la desigualdad anterior se escribe

$$U_{hkl}^2 \leq \frac{1}{2} + \frac{1}{2} U_{2h2k2l}.$$

Pero estamos en el caso centrosimétrico, así que la fase es simplemente un signo; si las magnitudes de U_{hkl} y U_{2h2k2l} son suficientemente cercanas a 1, esta desigualdad puede fijar el signo del segundo factor. Obtengamos otra relación interesante: consideremos dos factores de estructura $F_{\vec{h}}$ y $F_{\vec{h}'}$ y apliquemos de nuevo la desigualdad de Cauchy a

$$\begin{aligned} (F_{\vec{h}} + F_{\vec{h}'})^2 &= \int_V \rho(\vec{r}) \left[\cos(2\pi\vec{h}\vec{r}) + \cos(2\pi\vec{h}'\vec{r}) \right] d^3\vec{r} \\ &\leq \int_V 2\rho(\vec{r}) \cos^2(\pi(\vec{h} + \vec{h}')\vec{r}) \int_V 2\rho(\vec{s}) \cos^2(\pi(\vec{h} - \vec{h}')\vec{s}) \\ &= (F_{000}^2 + F_{000}F_{\vec{h}+\vec{h}'})(F_{000}^2 + F_{000}F_{\vec{h}-\vec{h}'}). \end{aligned}$$

En términos de los factores unitarios,

$$(U_{\vec{h}} + U_{\vec{h}'})^2 \leq (1 + U_{\vec{h}+\vec{h}'})(1 + U_{\vec{h}-\vec{h}'}).$$

Análogamente, se obtiene

$$(U_{\vec{h}} - U_{\vec{h}'})^2 \leq (1 - U_{\vec{h}+\vec{h}'})(1 - U_{\vec{h}-\vec{h}'}).$$

Y combinando ambas,

$$\begin{aligned} (|U_{\vec{h}}| + |U_{\vec{h}'}|)^2 &\leq \\ &\leq \left(1 + s(\vec{h})s(\vec{h}')s(\vec{h} + \vec{h}')|U_{\vec{h}+\vec{h}'}|\right) \left(1 + s(\vec{h})s(\vec{h}')s(\vec{h} - \vec{h}')|U_{\vec{h}-\vec{h}'}|\right), \end{aligned}$$

donde $s(\vec{k})$ denota el signo del factor de estructura $U_{\vec{k}}$. De nuevo, si las magnitudes de los factores de estructura involucrados son grandes, obtenemos una relación entre los signos,

$$s(\vec{h})s(\vec{h}')s(\vec{h} \pm \vec{h}') = 1,$$

lo que permite determinar el signo de uno de ellos, conocidos los otros dos. Estas relaciones, y otras semejantes que se pueden obtener, tienen una utilidad limitada, porque sólo proporcionan información cuando los coeficientes de Fourier son grandes. En los métodos directos que describiremos a continuación se obtienen relaciones semejantes, entendiéndolas siempre como estimaciones probabilísticas. Al final de la sección expondremos unos argumentos que permiten obtenerlas todas ellas (y otras muchas) desde un principio más general.

Pasemos a describir los métodos probabilísticos utilizados en el problema de la fase. En general, si hay N átomos en la celda unidad, se parte de considerar que los factores de estructura se pueden escribir

$$F_{\vec{h}} = \sum_{j=1}^N f_j e^{2\pi i \vec{h} \cdot \vec{r}_j},$$

donde \vec{r}_j son las posiciones de los átomos y los f_j son los *factores de scattering atómicos*, que describen la respuesta de cada átomo a la radiación incidente. Si en el modelo los átomos vienen dados por deltas de Dirac, estos factores serán simplemente los pesos atómicos Z_j ; pero en general dependerán de la dirección de la onda incidente (y por tanto de \vec{h}) e incluso de la temperatura y de la longitud de onda incidente. Para corregir esa dependencia, como antes, se definen los *factores de estructura unitarios*, $U_{\vec{h}}$, y los *factores de estructura normalizados*, $E_{\vec{h}}$,

$$U_{\vec{h}} = \sum_{j=1}^N \frac{f_j}{\left(\sum_{k=1}^N f_k\right)} e^{2\pi i \vec{h} \cdot \vec{r}_j}, \quad E_{\vec{h}} = \sum_{j=1}^N \frac{f_j}{\left(\sum_{k=1}^N f_k^2\right)^{1/2}} e^{2\pi i \vec{h} \cdot \vec{r}_j}.$$

Y se realiza la aproximación de que estos nuevos coeficientes no varían en el espacio recíproco (es decir, que no dependen de \vec{h}) aunque cuando los átomos involucrados no tienen pesos atómicos semejantes, puede ser una simplificación errónea.

El punto de partida de los métodos probabilísticos es suponer que las posiciones atómicas \vec{r}_j son variables aleatorias que se distribuyen por la celda unidad con una probabilidad *a priori* dada por una función q (que generalmente se supone que es la distribución uniforme). En estas condiciones, si seleccionamos un conjunto de índices $(\vec{h}_1, \vec{h}_2, \dots, \vec{h}_n)$, la contribución del átomo i -ésimo (de peso unidad) a los coeficientes de Fourier de índices *ut supra* viene dada por un vector aleatorio en \mathbb{C}^n ,

$$\mathbf{X}_i(\vec{r}_i) = \begin{pmatrix} \xi_1(\vec{r}_i) \\ \vdots \\ \xi_n(\vec{r}_i) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} e^{2\pi i (\vec{h}_1 \cdot \vec{r}_i)} \\ \vdots \\ e^{2\pi i (\vec{h}_n \cdot \vec{r}_i)} \end{pmatrix}.$$

Entonces, el vector de factores de estructura se puede escribir, por las hipótesis del modelo estocástico, como una suma de los vectores aleatorios \mathbf{X}_i

$$\mathbf{F} = \begin{pmatrix} F_{\vec{h}_1} \\ \vdots \\ F_{\vec{h}_n} \end{pmatrix} = \sum_{i=1}^N \mathbf{X}_i.$$

El propósito de esta descripción es obtener una estimación asintótica, cuando N es grande, para la distribución $\mathcal{P}(\mathbf{F})$ del vector \mathbf{F} , es decir, para la distribución conjunta de los factores de estructura F_{h_1}, \dots, F_{h_n} . Para ello se utilizan herramientas clásicas de la teoría de la probabilidad, que resumiremos brevemente. Supongamos que los átomos están distribuidos aleatoriamente con una distribución *a priori* $q(\vec{x})$. Entonces, la distribución inducida $P(\mathbf{X})$ del vector aleatorio \mathbf{X} es la medida singular P definida por

$$\int_{\mathbb{R}^{2n}} P(\mathbf{X}) G(\mathbf{X}) d^{2n} \mathbf{X} = \int_{\mathcal{V}} q(\vec{x}) G(\xi_1(\vec{x}), \dots, \xi_n(\vec{x})) d^3 \vec{x}$$

para toda función G con argumento en \mathbb{C}^n . En particular, los momentos y cumulantes de P pueden ser calculados con esta fórmula. Como los vectores \mathbf{X}_i están idéntica e independientemente distribuidos, su suma dará lugar a la convolución de sus distribuciones,

$$\mathcal{P} = \underbrace{P * \dots * P}_{N \text{ veces}}$$

y, por tanto, a la multiplicación de sus funciones características ($C = \mathcal{F}P$, $\mathcal{C} = \mathcal{F}\mathcal{P}$) y de sus funciones generadoras de momentos ($M(\vec{u}) = C(-i\vec{u})$, $\mathcal{M}(\vec{u}) = \mathcal{C}(-i\vec{u})$),

$$\mathcal{C} = C^N.$$

O, equivalentemente, a la suma de sus funciones generadoras de cumulantes ($K = \log M$, $\mathcal{K} = \log \mathcal{M}$),

$$\mathcal{K} = N K.$$

La densidad de probabilidad conjunta que buscamos será entonces

$$\mathcal{P}(\mathbf{F}) = \mathcal{F}_{\mathbf{u}}^{-1} [C^N](\mathbf{F}) = \mathcal{F}_{\mathbf{u}}^{-1} [M^N(i\mathbf{u})](\mathbf{F}) = \mathcal{F}_{\mathbf{u}}^{-1} [e^{(N K(i\mathbf{u}))}](\mathbf{F}).$$

Es necesario, pues, realizar una inversión de Fourier; pero generalmente esto no se puede hacer en una forma cerrada, y necesitaremos algún tipo de aproximación. Lo que se suele hacer es desarrollar, en el espacio de las variables \mathbf{u} , la función generadora de cumulantes K en torno al origen. Si recentramos \mathcal{P} en torno a su vector de primeros momentos $\mathbf{F}^0 = N\mathbf{U}_q$ (donde \mathbf{U}_q es el vector de coeficientes de Fourier de la distribución $q(\vec{x})$), los cumulantes de primer orden se anulan. Si separamos los términos de segundo orden de los de orden superior, obtenemos, volviendo a las funciones características, una gaussiana modulada por una exponencial de una serie de potencias con términos de órdenes mayores que dos. Si desarrollamos esta exponencial, obtenemos que podemos expresar \mathcal{C} como una serie de términos de la forma

$$(\text{Gaussiana}) \times (\text{monomios en las variables correspondientes}).$$

Y cada uno de estos términos puede ser sometido a una inversión de Fourier, dando lugar a funciones de Hermite en el caso centrosimétrico (véase [23]) o

a funciones de Laguerre en el no centrosimétrico [26]. Lo que se obtiene con esto es un desarrollo de $\mathcal{P}(\mathbf{F})$, asintótico en potencias de $N^{-1/2}$ y válido en un entorno de \mathbf{F}^0 , la *serie de Edgeworth* de $\mathcal{P}(\mathbf{F})$. ¿Cómo son los términos de la serie? Supongamos que la distribución $q(\vec{x})$ es uniforme y calculemos un momento general

$$m_{j_1 j_2 \dots j_n} = \int_{\mathcal{V}} q(\vec{x}) \prod_{l=1}^n \left[e^{2\pi i \vec{h}_l \cdot \vec{x}} \right]^{j_l} d^3 \vec{x}.$$

Es fácil ver que estos momentos son nulos a menos que $\sum_{l=1}^n j_l \vec{h}_l = \vec{0}$. Por tanto, la función de distribución conjunta de los $F_{\vec{h}_1}, \dots, F_{\vec{h}_n}$ dependerá sólo de aquellas combinaciones de fases

$$\sum_{l=1}^n j_l \varphi(\vec{h}_l)$$

cuyos coeficientes verifican la relación anterior, las llamadas *invariantes para la fase*. El siguiente paso es obtener unas distribuciones de probabilidad condicionales (particularizando los valores de los módulos de los factores de estructura) y extraer de ellas información sobre las fases. Con esto, se obtienen numerosas fórmulas probabilísticas que permiten ir asignando fases a los factores de estructura. Señalemos en el caso centrosimétrico, las relaciones de signos obtenidas por Sayre [36]

$$s(F_{\vec{h}})s(F_{\vec{h}'})s(F_{\vec{h}-\vec{h}'}) \approx +1,$$

con probabilidad de que sea cierta [11]

$$P = \frac{1}{2} + \frac{1}{2} \tanh \left(N^{-1/2} |E_{\vec{h}} E_{\vec{h}'} E_{\vec{h}-\vec{h}'}| \right);$$

la llamada relación Σ_2 de Hauptman y Karle, [21],

$$s(\vec{h}) = \sum_{\vec{h}'} s(\vec{h}') s(\vec{h} - \vec{h}')$$

y su análogo, [23]

$$P_+(E_{\vec{h}}) \approx \frac{1}{2} + \frac{1}{2} \tanh \left(N^{-1/2} |E_{\vec{h}}| \sum_{\vec{h}'} E_{\vec{h}'} E_{\vec{h}-\vec{h}'} \right).$$

Entre las que se obtienen en el caso no centrosimétrico, destaquemos la relación, véanse [10], [22]

$$\varphi_{\vec{h}} + \varphi_{\vec{h}'} + \varphi_{\vec{h}-\vec{h}'} \approx 0,$$

o la llamada *fórmula de la tangente* de Karle y Hauptman, [22], quizá una de las más utilizadas,

$$\tan \left(\varphi(\vec{h}) \right) = \frac{\sum_{\vec{h}'} 2N^{1/2} \left| E(\vec{h}) E(\vec{h}') E(\vec{h} - \vec{h}') \right| \sin[\varphi_{\vec{h}'} + \varphi_{\vec{h}-\vec{h}'}]}{\sum_{\vec{h}'} 2N^{1/2} \left| E(\vec{h}) E(\vec{h}') E(\vec{h} - \vec{h}') \right| \cos[\varphi_{\vec{h}'} + \varphi_{\vec{h}-\vec{h}'}]}.$$

Pero hagamos una somera crítica de estos desarrollos. El hecho de que se trabaje con series asintóticas requiere un especial cuidado a la hora de justificar los resultados. Por ejemplo, si partimos de una distribución de probabilidad $q(\vec{x})$ uniforme, obtenemos $\mathbf{F}^0 = \mathbf{0}$, es decir que el desarrollo será fiable en un entorno del origen. Pero curiosamente las fórmulas que se obtienen requieren que los factores de estructura sean grandes, para poder obtener estimaciones para las fases. Se llega así a la paradoja de que los desarrollos son más fiables allí donde proporcionan menos información y lo son muy poco donde proporcionarían mucha información. *¡Eppur si muove!*, las fórmulas que con ellas se obtienen permiten resolver muchas estructuras cristalinas. Bricogne [5] ha propuesto una mejora para los métodos directos: la idea fundamental es tener en cuenta cuál es la región del espacio de la \mathbf{F} en el que vamos a trabajar (que generalmente estará muy alejada del origen). El conocimiento de algunos factores de estructura se refleja en el espacio real en que la distribución de probabilidad ya no es uniforme. La idea es escoger una distribución $q(\vec{x})$ compatible con esos datos lo menos sesgada posible; y esto se traduce en una elección que maximice un cierto funcional, su entropía. Una formulación equivalente es la que llama *aproximación del punto silla*. Recordemos que en la construcción de la serie de Edgeworth, la función generadora de cumulantes $\log M$ era desarrollada en serie en las variables \mathbf{u} en torno al origen $\mathbf{u}_0 = \mathbf{0}$, dando lugar a un desarrollo asintótico de $\mathcal{P}(\mathbf{F})$ válida cerca de su centro, $\mathbf{F}^0 = N\mathbf{U}_q$. La esencia del método es que permite elegir el punto \mathbf{u}_0 alrededor del cual $\log M$ es desarrollada en función del valor de \mathbf{F} para el que se busca una buena evaluación de $\mathcal{P}(\mathbf{F})$. El criterio utilizado en esta elección es que todas las contribuciones importantes a la integral

$$\mathcal{P}(\mathbf{F}) = \mathcal{F}_{\mathbf{u}}^{-1} [e^{NK(i\mathbf{u})}] (\mathbf{F})$$

estén concentradas en un entorno de ese punto cuando $N \rightarrow \infty$. El valor óptimo de \mathbf{u}_0 resulta ser complejo, y se necesita entonces utilizar algunas técnicas de prolongación analítica para $\log M$.

En realidad, lo que hemos citado no es más que una pequeña parte del material que al respecto se ha escrito. No es nuestro propósito recogerlo aquí exhaustivamente, pero, para finalizar este repaso, recordemos que todas estas expresiones están recogidas en rutinas y programas, como el MULTAN o el SHELXTL, que son los que se utilizan en los laboratorios.

Para finalizar esta sección y este capítulo, comentemos unos resultados que permiten obtener las estimaciones vistas anteriormente de una forma sistemática y que no hemos visto citados en las referencias que hemos consultado. Dada una sucesión de números complejos $\{u_n\}$, diremos que es *definida positiva* si

$$\sum_{n,m} u_{m-n} c_m \bar{c}_n \geq 0$$

para toda sucesión (finita) $\{c_j\} \in \mathbb{C}$. Podemos relacionar esto con nuestro problema a través de un teorema debido a Herglotz (hay versiones para situaciones más generales. Herglotz lo probó para $G = \mathbb{Z}$, Bochner para $G = \mathbb{R}$ y Weil para grupos abelianos localmente compactos. En [35] se pueden encontrar las referencias adecuadas).

Teorema (Herglotz). *Una sucesión $\{u_n\}_{n=-\infty}^{\infty}$ es definida positiva si y sólo si existe una medida positiva en el toro tal que $\hat{\mu}(n) = u_n$.*

En nuestras consideraciones partimos de una medida positiva en el toro (la densidad electrónica). Sus coeficientes de Fourier

$$\begin{aligned} \hat{\mu}: \mathbb{Z} &\longrightarrow \mathbb{C} \\ n &\longmapsto \hat{\mu}(n) \end{aligned}$$

formarán una sucesión definida positiva; es decir, cumplirán que

$$\sum_{n,m} \hat{\mu}(m-n) c_m \bar{c}_n \geq 0, \quad \text{para toda sucesión finita } \{c_j\} \in \mathbb{C}.$$

Eligiendo distintas sucesiones $\{c_j\}$ se pueden conseguir resultados variados. Por ejemplo, si definimos

$$c_j = \begin{cases} 1, & \text{si } j = 0, \\ 0, & \text{en el resto,} \end{cases}$$

obtenemos que $\hat{\mu}(0) \geq 0$, que no aporta mucha información (es simplemente la positividad de μ). Pero si

$$c_j = \begin{cases} c_0, & \text{si } j = 0, \\ c_N, & \text{si } j = N, \\ 0, & \text{en el resto,} \end{cases}$$

ocurrirá que

$$0 \leq \hat{\mu}(0) [|c_0|^2 + |c_N|^2] + c_0 \bar{c}_N \hat{\mu}(-N) + c_N \bar{c}_0 \hat{\mu}(N).$$

Eligiendo $c_0 = c_N = 1$ y $c_0 = 1, c_N = i$ y combinándolas, deducimos que

$$\hat{\mu}(N) = \bar{\hat{\mu}}(-N) \quad \forall N,$$

que es la expresión de la llamada *ley de Friedel* en el contexto cristalográfico. Fijémonos que esto muestra algo que ya sabíamos, que la función de Patterson es centrosimétrica (lo sea o no la densidad de partida), pues

$$|\hat{\mu}(N)| = |\hat{\mu}(-N)| \quad \forall N.$$

O que en el caso centrosimétrico (con coeficientes de Fourier reales),

$$\hat{\mu}(N) = \hat{\mu}(-N) \quad \forall N.$$

Si tomamos $c_0 = 1$ y $c_N = -e^{-i \arg(\hat{\mu}(N))}$, se tiene que

$$|\hat{\mu}(N)| \leq \hat{\mu}(0) \quad \forall N,$$

la primera de las desigualdades que obteníamos antes. Para conseguir la relación entre las fases —que llamaremos φ_h , φ_k y φ_{h-k} — de los coeficientes de Fourier $\hat{\mu}(h)$, $\hat{\mu}(k)$ y $\hat{\mu}(h-k)$, podemos definir

$$c_j = \begin{cases} 1, & \text{si } j = 0, \\ |c_h|e^{i\alpha_h}, & \text{si } j = h, \\ |c_k|e^{i\alpha_k}, & \text{si } j = k, \\ 0, & \text{en el resto,} \end{cases}$$

y deducir que

$$\begin{aligned} 0 \leq & \hat{\mu}(0) [1 + |c_h|^2 + |c_k|^2] + 2|\hat{\mu}(h)||c_h| \cos(\varphi_h + \alpha_h) \\ & + 2|\hat{\mu}(k)||c_k| \cos(\varphi_k + \alpha_k) + 2|\hat{\mu}(h-k)||c_k||c_h| \cos(\varphi_{h-k} + \alpha_h - \alpha_k). \end{aligned}$$

Si ahora tomáramos $\alpha_k = \pi - \varphi_k$, $\alpha_h = \pi - \varphi_h$ y $|c_h| = |c_k| = \frac{1}{2}$, tendríamos que

$$0 \leq \frac{3}{2} + \frac{1}{2} \frac{|\hat{\mu}(h-k)|}{\hat{\mu}(0)} \cos(\varphi_{h-k} + \varphi_k - \varphi_h) - \left(\frac{|\hat{\mu}(h)|}{\hat{\mu}(0)} + \frac{|\hat{\mu}(k)|}{\hat{\mu}(0)} \right).$$

Por tanto, cuando $\frac{|\hat{\mu}(h)|}{\hat{\mu}(0)}, \frac{|\hat{\mu}(k)|}{\hat{\mu}(0)} \approx 1$,

$$\varphi_{h-k} + \varphi_k - \varphi_h \approx 0,$$

como escribíamos anteriormente. No profundizaremos en el estudio de las posibilidades que esta restricción sobre combinaciones lineales de los coeficientes de Fourier ofrece, pues sólo queríamos mostrar una forma de describir matemáticamente la noción de positividad, siempre invocada a la hora de fundamentar los métodos directos. Quizá un análisis más detallado se podría traducir en un algoritmo que permitiera discernir entre las fases aceptables y las que no lo son.

Capítulo 2

De series de Fourier reordenadas

2.1. Introducción

Para cualquier función $f \in L^1(\mathbf{T})$, podemos construir su serie de Fourier,

$$f(x) \sim \sum_{k=-\infty}^{\infty} \widehat{f}(k) e^{2\pi i k x},$$

donde

$$\widehat{f}(k) = \int_0^1 f(x) e^{-2\pi i k x} dx.$$

Interpretar el sentido de esta expresión (y de las análogas en otros espacios, $\mathbf{T}^n, \mathbb{R}^n$) ha sido el objetivo fundamental del Análisis Armónico. La manera tradicional de abordar el problema ha consistido en considerar las sumas parciales

$$S_N f(x) = \sum_{|k| \leq N} \widehat{f}(k) e^{2\pi i k x}$$

y establecer el sentido en el que se recupera la función de partida cuando se evalúa el límite $N \rightarrow \infty$ de estos objetos. Un primer resultado básico es que se tiene convergencia en norma, es decir, que si $f \in L^p(\mathbf{T})$, para $p > 1$, entonces

$$\|S_N f - f\|_p \rightarrow 0 \quad \text{cuando } N \rightarrow \infty.$$

La cuestión de la convergencia puntual es bastante más delicada, pero desde Carleson, *cf.* [8], sabemos que se tiene también convergencia de las sumas parciales a la función en casi todo punto si la función pertenece a la clase L^p , con $p > 1$.

Por supuesto, hay otras formas de interpretar estas series de Fourier, sumando los términos en otro orden, reordenando la serie. En este trabajo, como ya comentamos, estudiaremos una forma particular de reordenación,

pero que aparece de forma bastante natural en el contexto cristalográfico que hemos tratado de describir en el capítulo anterior: dado un cristal unidimensional, el espectro de difracción que obtenemos con el experimento de los rayos X nos proporciona la sucesión de coeficientes de Fourier $\{\widehat{f}(k)\}$. Si nos olvidamos del problema de la fase y suponemos que efectivamente tenemos la información completa a nuestra disposición, el problema real consiste en reconstruir la densidad electrónica (la función $f(x)$) a partir de ella. La forma más razonable de hacerlo sería prestando atención a los coeficientes de Fourier *de mayor tamaño*, que serán los que nos proporcionen más información. De hecho, experimentalmente tendremos un límite en la resolución de los aparatos de medida, de forma que no podremos detectar factores de estructura de magnitud menor que ese umbral. Por supuesto, estos mismos argumentos se pueden aplicar a otros contextos, como podría ser la aplicación de las series de Fourier a los algoritmos de procesado de imágenes o señales. ¿Cómo sería la descripción matemática de este *modus operandi*? Consistiría en considerar, para $\lambda > 0$, los operadores \tilde{S}_λ definidos por

$$\tilde{S}_\lambda f(x) = \sum_{|\widehat{f}(k)| > \lambda} \widehat{f}(k) e^{2\pi i k x}$$

y estudiar el límite $\lambda \rightarrow 0^+$.

Pese a surgir de forma muy natural en estos contextos, esta forma de sumar la serie trigonométrica no ha sido estudiada en detalle. Sin embargo, en un campo de reciente creación como es el Análisis con ondículas, quizá por haber estado más ligado a las aplicaciones desde su creación, existen resultados al respecto (ver, por ejemplo, el trabajo de Tao [40]).

En un artículo reciente, T. W. Körner, [24], contestaba a una cuestión planteada oralmente por L. Carleson y R. Coifman probando la existencia de una función en $L^2(\mathbf{T})$ que no se puede recuperar puntualmente al sumar su serie de Fourier reordenando los coeficientes por tamaños decrecientes. En concreto, probaba que existe una función $f \in L^2(\mathbf{T})$ tal que

$$\limsup_{\lambda \rightarrow 0^+} \left| \sum_{|\widehat{f}(k)| \geq \lambda} \widehat{f}(k) e^{2\pi i k x} \right| = \infty \quad \text{para casi todo } x \in \mathbf{T}.$$

La prueba de Körner, no constructiva, se basa en una ingeniosa modificación de una construcción de Olevskii para el sistema de Haar. Usando un lema probabilístico de R. Salem y A. Zygmund, construye unos bloques de frecuencias con coeficientes de tamaños similares pero convenientemente “barajados”.

Utilizando métodos distintos, construiremos ejemplos explícitos de funciones en L^p , $p < \frac{4}{3}$, para las que se produce el mismo fenómeno de divergencia puntual. Además, probaremos que la convergencia en L^p , para $p < 2$, también falla cuando sumamos la serie de Fourier de esta manera. Los argumentos utilizados se basan en algunos hechos conocidos de la Teoría de los Números,

como son las sumas de Gauss, el teorema de los números primos o la disección de Farey del intervalo $[0, 1)$.

Estos fenómenos de divergencia sugieren que $\tilde{S}_\lambda f$ quizá no sea la suma que se debe considerar. Podríamos argumentar que una razón por la que esta forma de recuperar la función falla es porque no se tiene en cuenta un cierto *principio de incertidumbre*: no tiene sentido imponer restricciones sobre el tamaño de los coeficientes $|\hat{f}(k)|$ sin hacerlo simultáneamente sobre la magnitud de las frecuencias $|k|$. Con esta idea en mente, definimos las **sumas parciales modificadas**

$$S_N^\delta f(x) = \sum_{\substack{|k| \leq N \\ |\hat{f}(k)| \geq N^{-\delta}}} \hat{f}(k) e^{2\pi i k x}, \quad \delta > 0.$$

Probaremos que el comportamiento de estos operadores cambia radicalmente cuando pasamos el exponente crítico $\delta = \frac{1}{2}$. Con más generalidad, dada una función decreciente ϕ , podríamos considerar las sumas parciales

$$S_N^\phi f(x) = \sum_{\substack{|k| \leq N \\ |\hat{f}(k)| \geq \phi(N)}} \hat{f}(k) e^{2\pi i k x}$$

y comprobar que el comportamiento de S_N^ϕ depende de la condición

$$N \cdot \phi^2(N) = o(1),$$

que tiene todo el sabor de un principio de incertidumbre. Estos resultados están recogidos en [16].

2.2. Sobre la divergencia puntual de los operadores \tilde{S}_λ

Nuestra intención es construir explícitamente una función de L^p para la que ocurra el fenómeno de divergencia descrito en el trabajo de Körner. En concreto, probaremos:

Teorema 2 *Existe una función $f \in L^p(\mathbf{T})$, para cada $p < \frac{4}{3}$, construida explícitamente, tal que*

$$\limsup_{\lambda \rightarrow 0^+} \left| \sum_{|\hat{f}(k)| \geq \lambda} \hat{f}(k) e^{2\pi i k x} \right| = \infty \quad \text{para casi todo } x \in \mathbf{T}.$$

2.2.1. Las sumas de Gauss

Empecemos recordando algunos hechos relacionados con una de las escasas sumas trigonométricas que sabemos evaluar explícitamente, las *sumas de Gauss*: dado un primo impar p , consideramos

$$G(n; p) = \sum_{m=1}^{p-1} \left(\frac{m}{p} \right) e^{2\pi i m \frac{n}{p}}, \text{ para todo entero } n \text{ primo con } p,$$

donde $\left(\frac{m}{p} \right)$ denota el símbolo de Legendre, que toma los valores

$$\left(\frac{m}{p} \right) = \begin{cases} 0, & \text{si } m \equiv 0 \pmod{p}, \\ 1, & \text{si } mRp, \\ -1, & \text{si } mNp. \end{cases}$$

Seguimos la notación habitual mRp si m es residuo cuadrático módulo p (es decir, si la congruencia $x^2 \equiv m \pmod{p}$ tiene solución), y mNp , en caso contrario. Es fácil comprobar (véase [14, 17] para los detalles) que podemos reescribir estas sumas como

$$G(n; p) = \sum_{k=0}^{p-1} e^{2\pi i k^2 \frac{n}{p}}$$

y que

$$G(n; p) = \left(\frac{n}{p} \right) G(1; p) = \left(\frac{n}{p} \right) \sum_{k=0}^{p-1} e^{2\pi i \frac{k^2}{p}}.$$

El valor exacto de $G(1; p)$ fue determinado por Gauss; numerosas pruebas han sido dadas posteriormente, pero la creada por Dirichlet, que utiliza la fórmula de sumación de Poisson, permite evaluar sumas algo más generales. Para cualquier entero positivo N ,

$$\sum_{k=0}^{N-1} e^{2\pi i \frac{k^2}{N}} = \begin{cases} (1+i) N^{1/2} & \text{si } N \equiv 0 \pmod{4}, \\ N^{1/2} & \text{si } N \equiv 1 \pmod{4}, \\ 0 & \text{si } N \equiv 2 \pmod{4}, \\ i N^{1/2} & \text{si } N \equiv 3 \pmod{4}. \end{cases}$$

Se pueden evaluar sumas todavía más generales, como son

$$\sum_{n=0}^{Q-1} e^{2\pi i n^2 \frac{P}{Q}},$$

donde Q es un entero positivo cualquiera y $(P, Q) = 1$, utilizando la descomposición de Q en factores primos y una cierta propiedad multiplicativa de

estas sumas. Pero si sólo queremos estimar su módulo, podemos utilizar el siguiente argumento: supongamos que Q es impar y escribamos

$$\left| \sum_{n=0}^{Q-1} e^{2\pi i n^2 \frac{P}{Q}} \right|^2 = \sum_{n=0}^{Q-1} \sum_{m=0}^{Q-1} e^{2\pi i (n^2 - m^2) \frac{P}{Q}} = \sum_{n=0}^{Q-1} \sum_{m=0}^{Q-1} e^{2\pi i (n+m)(n-m) \frac{P}{Q}}.$$

El cambio

$$\begin{cases} n + m = h \\ n - m = l \end{cases} \quad (\text{mód } Q)$$

es uno a uno si Q es impar, y podremos escribir

$$\left| \sum_{n=0}^{Q-1} e^{2\pi i n^2 \frac{P}{Q}} \right|^2 = \sum_{h=0}^{Q-1} \sum_{l=0}^{Q-1} e^{2\pi i h l \frac{P}{Q}} = Q,$$

donde hemos utilizado que cada una de las sumas interiores se corresponde con una suma de las raíces Q -ésimas de la unidad y que, por tanto, valen Q si $Q \mid h$ y 0 si $Q \nmid h$. En conclusión, el módulo de estas sumas (si Q es, por ejemplo, impar) vale siempre $Q^{1/2}$. (De hecho, estimaciones semejantes se pueden establecer para el módulo de sumas de Gauss incompletas, pero nosotros no las necesitaremos).

2.2.2. Construcción del contraejemplo

Consideremos las frecuencias contenidas en bloques diádicos

$$N^2 \leq n < 4N^2,$$

donde N será de la forma 2^k . Para cierto $\varepsilon > 0$, construimos:

$$F_N^1(x) = \frac{1}{N^{1/2-\varepsilon}} \sum_{n=N^2}^{4N^2-1} \cos(2\pi n x),$$

$$F_N(x) = \frac{1}{N^{1/2-\varepsilon}} \sum_{n=N^2}^{4N^2-1} a_n \cos(2\pi n x), \quad \text{con} \quad a_n = \begin{cases} 1 + \frac{1}{n} & \text{si } n = k^2, \\ 1 - \frac{1}{N^2} & \text{si } n \neq k^2. \end{cases}$$

Recordemos algunos hechos bien conocidos acerca del *núcleo de Dirichlet*

$$D_N(x) = 1 + 2 \sum_{n=1}^N \cos(2\pi n x) = \sum_{n=-N}^N e^{2\pi i n x} = \frac{\sin[\pi(2N+1)x]}{\sin(\pi x)}.$$

Su norma p se puede estimar

$$\|D_N\|_p^p \sim \frac{1}{N} \sum_k \frac{N^p}{k^p} = \begin{cases} \log(N) & \text{si } p = 1, \\ C_p N^{p-1} & \text{si } p > 1. \end{cases}$$

Con esto, podemos evaluar la norma L^p de las funciones F_N :

$$\|F_N\|_p \leq \|F_N - F_N^1\|_p + \|F_N^1\|_p \leq C \left(N^{\frac{3}{2}-\frac{2}{p}+\varepsilon} + N^{-1/2+\varepsilon} \right),$$

porque

$$\begin{aligned} \|F_N - F_N^1\|_p &= \frac{1}{N^{1/2-\varepsilon}} \left(\int_0^1 dx \left| \sum_{n=N^2}^{4N^2-1} (1-a_n) \cos(2\pi n x) \right|^p \right)^{1/p} \\ &\leq \frac{1}{N^{1/2-\varepsilon}} \left(\int_0^1 dx \left\{ \sum_{n=N^2}^{4N^2-1} \frac{1}{N^2} \right\}^p \right)^{1/p} \leq \frac{C}{N^{1/2-\varepsilon}}, \\ \|F_N^1\|_p &= \frac{C}{N^{1/2-\varepsilon}} \|D_{4N^2-1} - D_{N^2-1}\|_p \leq CN^{3/2-2/p+\varepsilon}. \end{aligned}$$

Si ahora construimos la función

$$F(x) = 1 + 2 \sum_{k=0}^{\infty} F_{2^k}(x),$$

podemos concluir que

$$\|F\|_p \leq 1 + 2 \sum_{k=0}^{\infty} \|F_{2^k}\|_p \leq C \sum_{k=0}^{\infty} 2^{k(\frac{3}{2}-\frac{2}{p}+\varepsilon)},$$

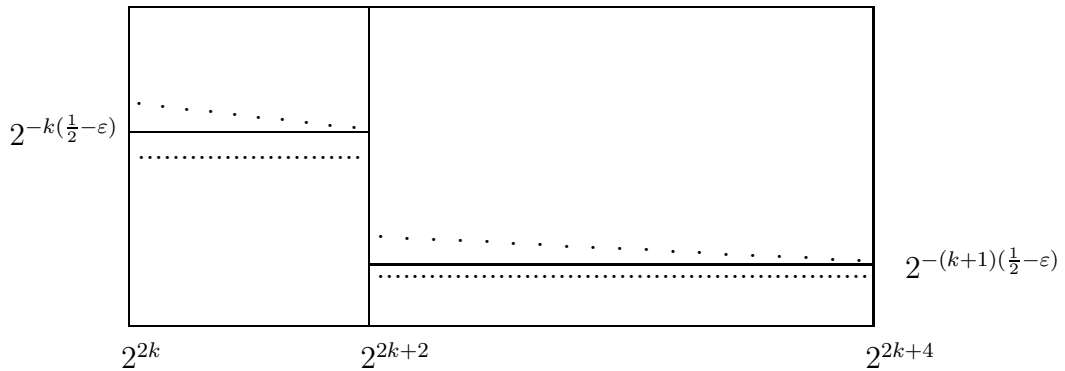
es decir que, dado $p < \frac{4}{3}$, podemos encontrar un ε suficientemente pequeño de forma que la función $F(x)$ pertenece a la clase L^p .

2.2.3. Prueba del Teorema 2

Supongamos construida nuestra función $F(x)$

$$F(x) = 1 + 2 \sum_{k=0}^{\infty} \frac{1}{2^{k(1/2-\varepsilon)}} \sum_{n=2^{2k}}^{2^{2k+2}-1} a_n \cos(2\pi n x), \text{ con } a_n = \begin{cases} 1 + \frac{1}{n} & \text{si } n = l^2, \\ 1 - \frac{1}{2^{2k}} & \text{si } n \neq l^2, \end{cases}$$

y que hemos fijado un ε suficientemente pequeño de forma que $F \in L^{p(\varepsilon)}$, con $p(\varepsilon)$ cercano a $\frac{4}{3}$. Fijémonos en cómo es su espectro:



Démonos una sucesión de enteros $\{n\} \nearrow \infty$ y definamos

$$b_n = \frac{1}{2^{n(\frac{1}{2}-\varepsilon)}} \left(1 + \frac{1}{j}\right),$$

donde $j = j(n)$ es un cierto entero $2^{2n} \leq j < 2^{2n+2}$ que definiremos más adelante. Si hacemos actuar \tilde{S}_{b_n} sobre la función $F(x)$, el operador guardará todas las frecuencias hasta 2^{2n} , y del siguiente bloque diádico sólo “leerá” algunas frecuencias (aquellos cuadrados menores que $2^{2n} + j$). En concreto,

$$\begin{aligned} \tilde{S}_{b_n} F(x) &= \sum_{|\hat{F}(\nu)| > b_n} \hat{F}(\nu) e^{2\pi i \nu x} \\ &= \sum_{|\nu| \leq 2^{2n}} \hat{F}(\nu) e^{2\pi i \nu x} + \frac{1}{2^{n(1/2-\varepsilon)}} \sum_{2^{2n} \leq m^2 < 2^{2n+j}} a_{m^2} e^{2\pi i m^2 x} \\ &= \sum_{|\nu| \leq 2^{2n}} \hat{F}(\nu) e^{2\pi i \nu x} + \frac{1}{2^{n(1/2-\varepsilon)}} \sum_{s=2^n}^{2^n+\sigma(j)} a_{s^2} e^{2\pi i s^2 x}, \end{aligned}$$

donde $\sigma(j)$ es aproximadamente \sqrt{j} . Teniendo en cuenta la definición de los a_l y el resultado de Carleson de convergencia de las sumas parciales, tendremos que, para casi todo x ,

$$|\tilde{S}_{b_n} F(x)| \geq \frac{1}{2^{n(1/2-\varepsilon)}} \left| \sum_{s=2^n}^{2^n+\sigma(j)} e^{2\pi i s^2 x} \right| - o(1) \quad \text{cuando } n \rightarrow \infty.$$

Elijamos la sucesión $\{b_n\}$ en función del punto. Fijamos un x irracional y consideramos la sucesión de sus convergentes $\{\frac{P_m}{Q_m}\}$. Es bien sabido que

$$\left| x - \frac{P_m}{Q_m} \right| < \frac{1}{Q_m^2}$$

Además, cumplen que

$$P_m Q_{m-1} - Q_m P_{m-1} = (-1)^{m+1} \quad \text{para } m = 1, 2, \dots,$$

así que no puede haber dos numeradores Q_m pares consecutivos. Tomemos entonces una sucesión de denominadores $\{Q_m\}$ de la sucesión de convergentes de x que sean impares y que determinen bloques diádicos

$$2^{n_m-1} \leq Q_m < 2^{n_m}$$

Con esta sucesión de índices $\{n = n_m\}$, construimos la sucesión citada anteriormente

$$b_n = \frac{1}{2^{n(\frac{1}{2}-\varepsilon)}} \left(1 + \frac{1}{j}\right),$$

donde elegimos $j = j(n, x)$ de forma que

$$\left| \sum_{s=2^n}^{2^n+\sigma(j)} e^{2\pi i s^2 x} \right| = \sup_{1 \leq k < 2^n} \left| \sum_{s=2^n}^{2^n+k} e^{2\pi i s^2 x} \right|.$$

Obviamente, nuestro objetivo es comparar esto con las sumas gaussianas, y para ello necesitaremos los siguientes resultados:

Hecho 1 Si $|x - x_0| \leq \frac{1}{M^2}$, entonces

$$\sup_{1 \leq k < M} \left| \sum_{j=M}^{M+k} e^{2\pi i j^2 x} \right| \geq C \sup_{1 \leq k < M} \left| \sum_{j=M}^{M+k} e^{2\pi i j^2 x_0} \right|.$$

Prueba. Llamemos

$$A(x) \equiv \sup_{1 \leq k < M} \left| \sum_{j=M}^{M+k} e^{2\pi i j^2 x} \right|.$$

Utilizaremos la fórmula de sumación por partes

$$\sum_{j=M}^{M+k} a_j b_j = \sum_{j=M}^{M+k-1} S_j (a_j - a_{j+1}) + a_{M+k} S_{M+k} \quad \text{con } S_l = \sum_{j=M}^l b_j.$$

y la notación

$$e_j(a) = e^{2\pi i j^2 a}.$$

Con esto,

$$\begin{aligned} A(x) &= \sup_{1 \leq k < M} \left| \sum_{j=M}^{M+k} e_j(x - x_0) e_j(x_0) \right| \\ &= \sup_{1 \leq k < M} \left| \sum_{j=M}^{M+k-1} \left(\sum_{\nu=M}^j e_\nu(x_0) \right) \left(e_j(x - x_0) - e_{j+1}(x - x_0) \right) \right. \\ &\quad \left. + e_{M+k}(x - x_0) \sum_{j=M}^{M+k} e_j(x_0) \right| \\ &\leq \sup_{1 \leq k < M} \left\{ \sum_{j=M}^{M+k-1} \left| \sum_{\nu=M}^j e_\nu(x_0) \right| \left| 1 - e^{2\pi i [(2j+1)(x-x_0)]} \right| + \left| \sum_{j=M}^{M+k} e_j(x_0) \right| \right\} \\ &\leq A(x_0) \sup_{1 \leq k < M} \left\{ 1 + \sum_{j=M}^{M+k-1} \left| 1 - e^{2\pi i [(2j+1)(x-x_0)]} \right| \right\} \\ &\leq A(x_0) \left\{ 1 + \frac{2\pi}{M^2} \sum_{j=M}^{2M-2} (2j+1) \right\} \\ &\leq CA(x_0). \end{aligned}$$

■

Hecho 2 Si $(P, Q) = 1$, con $\frac{M}{2} \leq Q < M$ y Q es impar, entonces

$$\sup_{1 \leq k < M} \left| \sum_{j=M}^{M+k} e^{2\pi i j^2 \frac{P}{Q}} \right| \geq \sqrt{Q}.$$

Prueba. Recordando los resultados sobre sumas de Gauss expuestos en el apartado 2.2.1,

$$\sup_{1 \leq k < M} \left| \sum_{j=M}^{M+k} e^{2\pi i j^2 \frac{P}{Q}} \right| \geq \left| \sum_{j=M}^{M+Q-1} e^{2\pi i j^2 \frac{P}{Q}} \right| = \left| \sum_{j=0}^{Q-1} e^{2\pi i j^2 \frac{P}{Q}} \right| = \sqrt{Q}.$$

■

Con esto, podemos terminar la demostración del Teorema 2. Como las convergentes de x se aproximan al punto de la forma deseada,

$$\left| x - \frac{P_m}{Q_m} \right| \leq \frac{1}{Q_m^2},$$

podemos concluir que

$$\begin{aligned} \left| \sum_{|\hat{F}(\nu)| \geq b_n} \hat{F}(\nu) e^{2\pi i \nu x} \right| &\geq \frac{1}{2^{n(1/2-\varepsilon)}} \left| \sum_{s=2^n}^{2^n+\sigma(j)} e^{2\pi i s^2 x} \right| + O(1) \\ &\geq \frac{C}{2^{n/2-n\varepsilon}} \sqrt{Q_m} + O(1) \geq C 2^{n\varepsilon} + O(1), \end{aligned}$$

y que, por tanto,

$$\sup_{\lambda \rightarrow 0^+} \left| \sum_{|\hat{F}(\nu)| \geq \lambda} \hat{F}(\nu) e^{2\pi i \nu x} \right| = \infty \quad \text{para casi todo } x \in [0, 1).$$

2.3. Sobre la divergencia en norma de los operadores \tilde{S}_λ

El objetivo de esta sección es probar que la convergencia en L^p para $p < 2$ también puede fallar para las sumas parciales \tilde{S}_λ . En concreto, probaremos el siguiente teorema:

Teorema 3 a) Si definimos un operador maximal

$$\tilde{S}^* f(x) = \sup_{\lambda > 0} \left| \tilde{S}_\lambda f(x) \right|,$$

entonces, para todo $1 \leq p < 2$, existe una función $f \in L^p(\mathbf{T})$ (explícitamente construida) para la que

$$\|\tilde{S}^* f\|_p = \infty.$$

b) Para cada $p < 2$, existe una función $f \in L^p(\mathbf{T})$ tal que

$$\limsup_{\lambda \rightarrow 0^+} \|\tilde{S}_\lambda f\|_p = \infty.$$

En este caso, lo que nos servirá para construir el ejemplo son unas estimaciones sobre el tamaño de ciertas sumas trigonométricas sobre primos. Tomemos N suficientemente grande y consideremos el siguiente objeto:

$$P_N^*(x) = \max_{1 \leq j \leq N} |P_N^j(x)| = \max_{1 \leq j \leq N} \left| \sum_{\substack{p \text{ primo} \\ N < p \leq N+j}} e^{2\pi i p x} \right|.$$

Entonces, se tiene el siguiente:

Lema 2

$$\|P_N^*\|_r \geq C N^{3/4-1/2r} \log^{-1-1/r}(N), \text{ para todo } 1 < r < 2.$$

Prueba. Consideremos primero los primos q , $\sqrt{N} \leq q < \sqrt{2N}$. Para cada a , $(a, q) = 1$, podemos construir los intervalos de Farey

$$I_{a/q} = \left(\frac{a}{q} - \frac{1}{8q^2}, \frac{a}{q} + \frac{1}{8q^2} \right).$$

Es fácil comprobar que estos intervalos son disjuntos dos a dos si tomamos dos pares distintos (a, q) y (a', q') y evaluamos la distancia entre los centros de los intervalos correspondientes:

$$\begin{aligned} \left| \frac{a}{q} - \frac{a'}{q'} \right| &= \left| \frac{aq' - a'q}{qq'} \right| \geq \frac{1}{qq'} > \frac{1}{2N} = \frac{1}{8} \left(\frac{2N + 2N}{N^2} \right) \\ &\geq \frac{1}{8} \left(\frac{q^2 + q'^2}{q^2 q'^2} \right) = \frac{1}{8q^2} + \frac{1}{8q'^2}, \end{aligned}$$

donde hemos utilizado que $aq' - a'q \neq 0$. Si formamos el conjunto

$$E_N = \bigcup_{\substack{q \text{ primo} \\ \sqrt{N} \leq q < \sqrt{2N}}} \bigcup_{a=1}^{q-1} I_{a/q},$$

y tenemos en cuenta que los intervalos $I_{a/q}$ son disjuntos, obtenemos

$$\begin{aligned} \|P_N^*\|_r^r &= \int_0^1 (P_N^*(x))^r dx \geq \int_{E_N} (P_N^*(x))^r dx \\ &= \sum_{\substack{q \text{ primo} \\ \sqrt{N} \leq q < \sqrt{2N}}} \sum_{a=1}^{q-1} \int_{I_{a/q}} (P_N^*(x))^r dx. \end{aligned}$$

Para seguir adelante, querríamos que el integrando $P_N^*(x)$ fuera comparable con el valor en el centro del intervalo. Pero esto es cierto, como prueba el siguiente

Hecho 3 Si $|x - y| \leq \frac{1}{8q^2}$, con $q \geq \sqrt{N}$, entonces $P_N^*(x) \geq CP_N^*(y)$.

Prueba. La prueba es una simple aplicación de la fórmula de Abel de suma-
ción por partes.

$$\begin{aligned}
P_N^*(y) &= \max_{1 \leq j \leq N} |P_N^j(y)| = \max_{1 \leq j \leq N} \left| \sum_{\substack{p \text{ primo} \\ N \leq p \leq N+j}} e^{2\pi i p y} \right| \\
&= \max_{1 \leq j \leq N} \left| \sum_{k=1}^{\nu(j)} e^{2\pi i p_k y} \right| = \max_{1 \leq j \leq N} \left| \sum_{k=1}^{\nu(j)} e^{2\pi i p_k (y-x)} e^{2\pi i p_k x} \right| \\
&= \max_{1 \leq j \leq N} \left| \sum_{k=1}^{\nu(j)-1} (e^{2\pi i p_k (y-x)} - e^{2\pi i p_{k+1} (y-x)}) \left(\sum_{\nu=1}^k e^{2\pi i p_\nu x} \right) \right. \\
&\quad \left. + e^{2\pi i p_{\nu(j)} (y-x)} \sum_{\nu=1}^{\nu(j)} e^{2\pi i p_\nu x} \right| \\
&\leq \max_{1 \leq j \leq N} \left\{ \sum_{k=1}^{\nu(j)-1} |e^{2\pi i p_k (y-x)} - e^{2\pi i p_{k+1} (y-x)}| \underbrace{\left| \sum_{\nu=1}^k e^{2\pi i p_\nu x} \right|}_{\leq P_N^*(x)} + \underbrace{\left| \sum_{\nu=1}^{\nu(j)} e^{2\pi i p_\nu x} \right|}_{\leq P_N^*(x)} \right\} \\
&\leq P_N^*(x) \left\{ 1 + \max_{1 \leq j \leq N} \sum_{k=1}^{\nu(j)-1} |1 - e^{2\pi i (x-y)(p_{k+1}-p_k)}| \right\} \\
&= P_N^*(x) \left\{ 1 + \sum_{k=1}^{\nu(N)-1} |1 - e^{2\pi i (x-y)(p_{k+1}-p_k)}| \right\} \\
&\leq P_N^*(x) \left\{ 1 + 2\pi |y-x| \underbrace{\sum_{k=1}^{\nu(N)-1} (p_{k+1} - p_k)}_{p_{\nu(N)} - p_1 \leq N} \right\} \stackrel{|y-x| \leq \frac{1}{8q^2} \leq \frac{1}{8N}}{\leq} \\
&\leq P_N^*(x) \left\{ 1 + 2\pi \frac{1}{8N} N \right\} = P_N^*(x) \left\{ 1 + \frac{2\pi}{8} \right\}
\end{aligned}$$

■

Así que podemos escribir (C es una constante diferente cada vez),

$$\begin{aligned}
\|P_N^*\|_r^r &\geq C \sum_{\substack{q \text{ primo} \\ \sqrt{N} \leq q < \sqrt{2N}}} \sum_{a=1}^{q-1} \int_{I_{a/q}} (P_N^*(a/q))^r dx \\
&\geq C \sum_{\substack{q \text{ primo} \\ \sqrt{N} \leq q < \sqrt{2N}}} \frac{1}{q^2} \sum_{a=1}^{q-1} \left| \sum_{\substack{p \text{ primo} \\ N < p < 2N}} e^{2\pi i p a/q} \right|^r \\
&= C \sum_{\substack{q \text{ primo} \\ \sqrt{N} \leq q < \sqrt{2N}}} \frac{1}{q^2} \sum_{a=1}^{q-1} \left| \sum_{\substack{p \text{ primo} \\ N < p < 2N \\ p \equiv r(q)}} e^{2\pi i p a/q} \right|^r \\
&= C \sum_{\substack{q \text{ primo} \\ \sqrt{N} \leq q < \sqrt{2N}}} \frac{1}{q^2} \sum_{a=1}^{q-1} \left| \sum_{r=1}^{q-1} e^{2\pi i r a/q} [\pi(2N, q, r) - \pi(N, q, r)] \right|^r,
\end{aligned}$$

donde $\pi(x, a, b)$, con $(a, b) = 1$, cuenta el número de primos menores o iguales que x en la progresión aritmética $b, b+a, b+2a, b+3a, \dots$. Para simplificar notación, llamaremos $b_{N,q,r}$ a la diferencia de funciones π en la expresión, de forma que $b_{N,q,r} \geq 0$. Entonces, si aplicamos la desigualdad

$$\left(\sum |a_j|^r \right)^{1/r} \geq \left(\sum |a_j|^2 \right)^{1/2}, \quad \text{válida si } r \leq 2,$$

podemos escribir

$$\begin{aligned}
\|P_N^*\|_r^r &\geq C \sum_{\substack{q \text{ primo} \\ \sqrt{N} \leq q < \sqrt{2N}}} \frac{1}{q^2} \left\{ \sum_{a=1}^{q-1} \left| \sum_{r=1}^{q-1} e^{2\pi i r a/q} b_{N,q,r} \right|^2 \right\}^{r/2} \\
&= C \sum_{\substack{q \text{ primo} \\ \sqrt{N} \leq q < \sqrt{2N}}} \frac{1}{q^2} \left\{ (q-1) \sum_{r=1}^{q-1} b_{N,q,r}^2 + \sum_{r \neq s} b_{N,q,r} b_{N,q,s} \sum_{a=1}^{q-1} e^{2\pi i a(r-s)/q} \right\}^{r/2} \\
&= C \sum_{\substack{q \text{ primo} \\ \sqrt{N} \leq q < \sqrt{2N}}} \frac{1}{q^2} \left\{ (q-1) \sum_{r=1}^{q-1} b_{N,q,r}^2 - \sum_{r \neq s} b_{N,q,r} b_{N,q,s} \right\}^{r/2}.
\end{aligned}$$

Es fácil comprobar que se tiene la desigualdad

$$N \sum_{j=1}^N a_j^2 - \sum_{j \neq k} a_j a_k \geq \sum_{j=1}^N a_j^2.$$

Utilizándola, obtenemos que

$$\|P_N^*\|_r^r \geq C \sum_{\substack{q \text{ primo} \\ \sqrt{N} \leq q < \sqrt{2N}}} \frac{1}{q^2} \left\{ \sum_{r=1}^{q-1} b_{N,q,r}^2 \right\}^{r/2} \geq \frac{C}{N} \sum_{\substack{q \text{ primo} \\ \sqrt{N} \leq q < \sqrt{2N}}} \left\{ \sum_{r=1}^{q-1} b_{N,q,r}^2 \right\}^{r/2}.$$

El siguiente paso consistiría en intentar estimar el tamaño de la suma interior $\sum_{r=1}^{q-1} b_{N,q,r}^2$. En general resulta bastante difícil obtener cotas inferiores para la magnitud de los $b_{N,q,r}$, incluso asumiendo la Hipótesis de Riemann generalizada, especialmente si queremos que las estimaciones sean uniformes en q y r (en el rango considerado). Afortunadamente, estamos trabajando con la suma de los cuadrados, y eso facilita las cosas. Por la desigualdad de Cauchy y el teorema de Chebyshev, tenemos que

$$(q-1) \sum_{r=1}^{q-1} b_{N,q,r}^2 \geq \left(\sum_{r=1}^{q-1} b_{N,q,r} \right)^2 > C \frac{N^2}{\log^2(N)}.$$

Así que

$$\begin{aligned} \|P_N^*\|_r^r &\geq \frac{C}{N} \sum_{\substack{q \text{ primo} \\ \sqrt{N} \leq q < \sqrt{2N}}} \left(\frac{N^2}{(q-1) \log^2(N)} \right)^{r/2} \\ &\geq \frac{C}{N} \frac{N^r}{N^{r/4} \log^r(N)} \#\{\text{primos } q / \sqrt{N} \leq q < \sqrt{2N}\} \\ &\geq C N^{\frac{3r}{4} - \frac{1}{2}} \log^{-r-1}(N) \end{aligned} \quad \blacksquare$$

2.3.1. Construcción básica

Nuestro objetivo es construir una función que esté en L^p , para todo $p < 2$, cuyos coeficientes de Fourier sean distintos dependiendo de si la frecuencia es prima o no, de forma que al aplicar el operador \tilde{S}_λ nos quedemos con una de esas sumas trigonométricas para las que hemos obtenido estimaciones anteriormente. Empecemos fijando un $\alpha > 0$ (que determinaremos luego) y construyendo

$$\begin{aligned} f_1(x) &= 1 + 2 \underbrace{\sum_{k=0}^{\infty} \frac{1}{2^{k\alpha}} \sum_{n=2^k}^{2^{k+1}} \cos(2\pi n x)}_{f_{2^k}^1(x)} \\ f(x) &= 1 + 2 \underbrace{\sum_{k=0}^{\infty} \frac{1}{2^{k\alpha}} \sum_{n=2^k}^{2^{k+1}} a_n \cos(2\pi n x)}_{f_{2^k}(x)} \quad \text{donde } a_n = \begin{cases} 1 + \frac{1}{n} & \text{si } n \text{ primo,} \\ 1 - \frac{1}{2^k} & \text{si no.} \end{cases} \end{aligned}$$

Con los mismos argumentos sobre la norma p del núcleo de Dirichlet utilizados en la sección anterior, podemos evaluar

$$\|f_{2^k}\|_p \leq \|f_{2^k} - f_{2^k}^1\|_p + \|f_{2^k}^1\|_p \leq C \left(2^{k(1-\frac{1}{p}-\alpha)} + 2^{-k\alpha} \right).$$

Por tanto,

$$\|f\|_p \leq 1 + 2 \sum_{k=0}^{\infty} \|f_{2^k}\|_p \leq C_1 + C_2 \sum_{k=0}^{\infty} 2^{k(1-\frac{1}{p}-\alpha)}.$$

En conclusión, la función f que construimos está en la clase $L^p(\mathbf{T})$ siempre que $\alpha > 1 - \frac{1}{p}$.

2.3.2. Prueba del Teorema 3

Nuestras sumas parciales eran

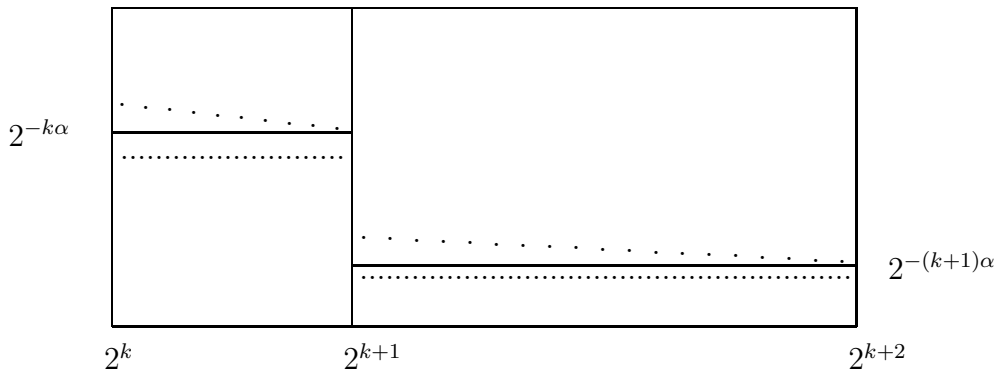
$$\tilde{S}_\lambda f(x) = \sum_{|\hat{f}(k)| > \lambda} \hat{f}(k) e^{2\pi i k x},$$

y la función f construida en el apartado anterior era

$$f(x) = 1 + 2 \sum_{k=0}^{\infty} \frac{1}{2^{k\alpha}} \sum_{n=2^k}^{2^{k+1}} a_n \cos(2\pi n x),$$

$$\text{donde } a_n = \begin{cases} 1 + \frac{1}{n} & \text{si } n \text{ es primo,} \\ 1 - \frac{1}{2^k} & \text{si no.} \end{cases}$$

Ya vimos que esta función pertenecía a la clase L^p si $\alpha > 1 - 1/p$. Su espectro tiene el siguiente aspecto:



Tomemos una sucesión $\{b_k\}$ adaptada a nuestra construcción: para cada $k = 0, 1, 2, \dots$ y para cierto primo j , $2^k \leq j \leq 2^{k+1}$ (veremos luego cómo hay que elegirlo), definimos

$$b_k = \frac{1}{2^{k\alpha}} \left(1 + \frac{1}{j} \right) \searrow 0 \quad \text{cuando } k \rightarrow \infty.$$

El operador \tilde{S}_{b_k} mantiene todas las frecuencias hasta 2^k ; del siguiente bloque diádico, retiene sólo algunas frecuencias primas (aquellas menores que $2^k + j$):

$$|\tilde{S}_{b_k} f(x)| \geq \frac{1}{2^{k\alpha}} \left| \sum_{\substack{\nu \text{ primo} \\ 2^k \leq \nu \leq 2^k + j}} e^{2\pi i \nu x} \right| - \underbrace{\left| \sum_{|\nu| \leq 2^k} \hat{f}(\nu) e^{2\pi i \nu x} \right|}_I + \underbrace{\left| \sum_{\substack{\nu \text{ primo} \\ 2^k \leq \nu \leq 2^k + j}} \frac{e^{2\pi i \nu x}}{\nu} \right|}_{II}.$$

Para cada $x \in \mathbf{T}$, podemos escoger $j = j(x)$ de manera que el primer término valga $2^{-k\alpha} P_{2^k}^*(x)$ (véase el lema 2 para la definición de P_N^*).

Por otro lado, los términos I y II están acotados cuando $k \rightarrow \infty$, de forma que, para todo $x \in \mathbf{T}$, se tiene que

$$\sup_{\lambda > 0} \left| \tilde{S}_\lambda f(x) \right| \geq \frac{1}{2^{k\alpha}} P_{2^k}^*(x) - O(1).$$

Y que, por tanto

$$\|\tilde{S}^* f\|_p \geq \frac{1}{2^{k\alpha}} \|P_{2^k}^*\|_p - O(1).$$

Si recordamos el lema 2, con $N = 2^k$, obtenemos que

$$\|\tilde{S}^* f\|_p \geq C_p 2^{k(3/4 - 1/2p - \alpha)} k^{-1 - 1/p} - O(1).$$

Así que la norma p de estos objetos diverge cuando

$$\alpha < \frac{3}{4} - \frac{1}{2p}.$$

Reuniéndolo todo, para cada $1 \leq p < 2$, podemos encontrar un α tal que

$$1 - \frac{1}{p} < \alpha < \frac{3}{4} - \frac{1}{2p},$$

de forma que que la función f construida anteriormente satisface

$$\|f\|_p < \infty \quad \text{y} \quad \|\tilde{S}^* f\|_p = \infty.$$

Esto completa la demostración de la parte a) del Teorema 3.

Para probar la parte b), necesitamos un argumento extra. Empecemos recordando la bien conocida estimación de Khintchin ([43])

$$\left[\int_0^1 \int_0^1 \left| \sum_{k=2^n}^{2^{n+1}-1} r_k(t) e^{2\pi i k x} \right|^p dx dt \right]^{1/p} \sim 2^{\frac{n}{2}},$$

donde $\{r_k(t)\}$ es el sistema ortonormal de funciones de Rademacher. Con ella, podemos demostrar la existencia, para cada $p < 2$, de un polinomio

$$P_n(x) = \sum_{k=2^n}^{2^{n+1}-1} a_k e^{2\pi i k x}, \quad \text{donde } a_k \in \{0, 1\},$$

con

$$\|P_n\|_p \geq C_p 2^{\frac{n}{2}},$$

para cierta constante $C_p > 0$. Ahora, para una cierta constante $\alpha > 0$ que determinaremos luego, definimos el polinomio

$$Q_n(x) = \sum_{k=2^n}^{2^{n+1}-1} b_k e^{2\pi i k x},$$

donde

$$b_k = \begin{cases} 2^{-n\alpha} & \text{si } a_k = 1, \\ 2^{-n\alpha} - 2^{-n} & \text{si } a_k = 0. \end{cases}$$

Es fácil evaluar su norma p :

$$\|Q_n\|_p \leq C_p 2^{n(1-\frac{1}{p}-\alpha)} + C'_p 2^{-\frac{n}{2}},$$

así que la función

$$f(x) = \sum_{n=1}^{\infty} Q_n(x)$$

satisface que

$$\|f\|_p < \infty \quad \text{si} \quad \alpha > 1 - \frac{1}{p}.$$

Pero, por otro lado,

$$\sum_{|\hat{f}(k)| \geq 2^{-n\alpha}} \hat{f}(k) e^{2\pi i k x} = \sum_{|k| \leq 2^n} \hat{f}(k) e^{2\pi i k x} + 2^{-n\alpha} P_n(x),$$

y por tanto

$$\begin{aligned} \left\| \sum_{|\hat{f}(k)| \geq 2^{-n\alpha}} \hat{f}(k) e^{2\pi i k x} \right\|_p &\geq 2^{-n\alpha} \|P_n\|_p - O(1) \\ &\geq C_p 2^{n(1/2-\alpha)} - O(1). \end{aligned}$$

Consecuentemente, para cada $p < 2$ podemos encontrar un α , $1 - 1/p < \alpha < 1/2$, de forma que

$$\|f\|_p < \infty \quad \text{y} \quad \limsup_{\lambda \rightarrow 0^+} \|\tilde{S}_\lambda f\|_p = \infty,$$

lo que termina la prueba del apartado b) del Teorema 3.

2.4. Las sumas parciales modificadas

Consideremos, para cada $\delta > 0$, las sumas parciales modificadas

$$S_N^\delta f(x) = \sum_{\substack{|k| \leq N \\ |\widehat{f}(k)| \geq N^{-\delta}}} \widehat{f}(k) e^{2\pi i k x}.$$

Teorema 4 a) Si $\delta < \frac{1}{2}$, entonces, para todo $p < 2$, existe una función $f \in L^p(\mathbf{T})$ tal que

$$\| \limsup_{N \rightarrow \infty} S_N^\delta f \|_p = \infty.$$

b) Si $\delta \geq \frac{1}{2}$, entonces

$$\sup_N \|S_N^\delta f\|_p < \infty \quad \text{para toda } f \in L^p(\mathbf{T}) \quad , \quad 1 < p \leq 2.$$

c) Si $\delta > \frac{1}{2}$, se tiene que

$$\lim_{N \rightarrow \infty} \|S_N^\delta f - f\|_p = 0 \quad \text{para toda } f \in L^p(\mathbf{T}) \quad , \quad 1 < p \leq 2.$$

d) Por último, si $\delta = \frac{1}{2}$, entonces para todo $p < 2$ existe una $f \in L^p(\mathbf{T})$ para la que

$$\limsup_{N \rightarrow \infty} \|S_N^\delta f - f\|_p > 0.$$

Caso $\delta \geq \frac{1}{2}$

Comparemos estos operadores con las sumas parciales. Para $1 < p \leq 2$,

$$\|S_N^\delta f - f\|_p \leq \|S_N^\delta f - S_N f\|_p + \|S_N f - f\|_p \leq \|S_N^\delta f - S_N f\|_2 + o(1)$$

y además,

$$\|S_N^\delta f - S_N f\|_2 = \left\| \sum_{\substack{|k| \leq N \\ |\widehat{f}(k)| < N^{-\delta}}} \widehat{f}(k) e^{2\pi i k x} \right\|_2 \leq C N^{1/2-\delta}.$$

Lo que prueba c) y, tras la desigualdad triangular, también b).

Caso $\delta < \frac{1}{2}$

Una función semejante a la obtenida en el apartado 2.3.1 nos servirá para analizar este caso. Empecemos con

$$f_k(x) = \frac{1}{2^{k/2}} \sum_{n=2^k}^{2^{k+1}} a_n e^{2\pi i n x}, \quad \text{con } a_n = \begin{cases} 1 + \frac{1}{n} & \text{si } n \text{ es primo,} \\ 1 - \frac{1}{2^k} & \text{si no,} \end{cases}$$

que cumple que

$$f(x) = \sum_k f_k(x) \quad \text{está en la clase } L^p \text{ para todo } p < 2.$$

Lo que queremos es estimar

$$S_N^\delta f(x) = \sum_{\substack{|\nu| \leq N \\ |\hat{f}(\nu)| \geq N^{-\delta}}} \hat{f}(\nu) e^{2\pi i \nu x}.$$

Si lo hacemos sobre una sucesión $\{N_n\}$ definida por

$$N_n^{-\delta} = 2^{-n/2} \left(1 + \frac{1}{j}\right),$$

para cierto j , $2^n \leq j < 2^{n+1}$, es fácil ver que

$$\sum_{\substack{|k| \leq N_n \\ |\hat{f}(\nu)| \geq N_n^{-\delta}}} \hat{f}(\nu) e^{2\pi i \nu x}.$$

se reduce a

$$\sum_{|\hat{f}(\nu)| \geq N_n^{-\delta}} \hat{f}(\nu) e^{2\pi i \nu x}$$

es decir, que podemos olvidar el corte en frecuencias. Y ya vimos en el apartado 2.3.2 que la norma del supremo de estas sumas divergía cuando $n \rightarrow \infty$ con las adecuadas elecciones de j .

Caso $\delta = \frac{1}{2}$

Podemos usar los mismos argumentos con las funciones de Rademacher utilizados en la prueba del apartado b) del Teorema 3, *mutatis mutandis*, para construir, para cada $p < 2$, un polinomio P_n , con coeficientes 0 o 1, de forma que $\|P_n\|_p \geq C_p 2^{\frac{n}{2}}$ para cierta constante $C_p > 0$; y un polinomio Q_n (poniendo $\alpha = 1/2$ en la definición de los coeficientes que se daba entonces) de manera que

$$\|Q_n\|_p \leq C'_p 2^{n(\frac{1}{2} - \frac{1}{p})}.$$

Con esto, la función

$$f(x) = \sum_{n=1}^{\infty} Q_n(x) \quad \text{satisface} \quad \|f\|_p \leq C'_p \sum_{n=1}^{\infty} 2^{-n(\frac{1}{p} - \frac{1}{2})} < \infty.$$

Por otro lado,

$$\sum_{\substack{|k| \leq 2^n \\ |\hat{f}(k)| \geq 2^{-\frac{n}{2}}}} \hat{f}(k) e^{2\pi i k x} = \sum_{|k| \leq 2^{n-1}} \hat{f}(k) e^{2\pi i k x} + 2^{-\frac{n}{2}} P_n(x),$$

y, por tanto,

$$\begin{aligned} \left\| \sum_{\substack{|k| \leq 2^n \\ |\widehat{f}(k)| \geq 2^{-\frac{n}{2}}} \widehat{f}(k) e^{2\pi i k x} - f \right\|_p &\geq 2^{-\frac{n}{2}} \|P_n\|_p - \left\| \sum_{k=n}^{\infty} Q_k \right\|_p \\ &\geq C_p - o(1) \quad \text{cuando } n \rightarrow \infty. \end{aligned}$$

Y esto completa la prueba del apartado *d)* del Teorema 4.

Nota final. Tras la redacción de estos resultados, hemos encontrado una referencia [41] en la que se prueba un resultado sobre la norma L^1 de sumas trigonométricas sobre primos que mejora la estimación obtenida en el lema 2. En concreto, se tiene

Teorema (R.C. Vaughan) *Si definimos*

$$S(x) = \sum_{n \leq N} \Lambda(n) e^{2\pi i n x},$$

donde Λ es la función de von Mangoldt, se tiene que existe una constante positiva C tal que para todo $N \geq 2$,

$$\int_0^1 |S(x)| dx \geq C N^{1/2}.$$

Esta cota inferior de la norma uno se traduce en estimaciones similares (pagando con un factor de tipo logarítmico, quizá) para la norma uno de las sumas

$$\sum_{p \leq N} e^{2\pi i p x}.$$

Aunque esta estimación no mejoraría los resultados obtenidos, sí permitiría construir una función con coeficientes de tamaño $N^{-1/2} \log^\beta(N)$ en lugar del $N^{-1/2+\varepsilon}$ que considerábamos, que estuviera en todo L^p , con $p < 2$ y para la que el fenómeno de divergencia en norma descrito se produjera.

Además, proporciona una prueba de que el multiplicador de los primos es un operador que sólo está acotado de L^2 en L^2 , como por otra parte era necesario para que pudieran existir los contraejemplos descritos (del mismo modo que la no acotación de L^p en L^p , $p < 4/3$, del multiplicador sobre los cuadrados permitía encontrar los contraejemplos de la primera sección).

Bibliografía

- [1] E. F. BERTAUT: Le méthode statistique en cristallographie I. *Acta Crystallographica* **8** (1955), 537–543.
- [2] E. F. BERTAUT: Le méthode statistique en cristallographie II. Quelques applications. *Acta Crystallographica* **8** (1955), 544–548.
- [3] E. F. BERTAUT: Fonctions de répartition: application a l’approche directe des structures. *Acta Crystallographica* **8** (1955), 823–832.
- [4] M. BORN, E. WOLF: *Principles of Optics*. Pergamon Press, 1980.
- [5] G. BRICOGNE: Maximum Entropy and the Foundations of Direct Methods. *Acta Crystallographica A* **40** (1984), 410–445.
- [6] J. BRILLHART, G. F. ROYLE, A. M. ODLYZCO: On an irreducibility theorem of A. Cohn. *Canad. J. Math.* **33** (1981), 1055–1059.
- [7] A. CALDERÓN, R. PEPINSKY: *Computing methods and the Phase problem in X-Ray Crystal Analysis*. Penns. State College, College Park, (1952), 319–338.
- [8] L. CARLESON: On the convergence and growth of partial sums of Fourier series. *Acta Math.* **116** (1966), 135–157.
- [9] J. CASAS: *Óptica*. Zaragoza, 1983.
- [10] W. COCHRAN: *Acta Crystallographica* **8** (1955), 473.
- [11] W. COCHRAN, M. WOOLFSON: *Acta Crystallographica* **8** (1955), 1.
- [12] A. CÓRDOBA: La formule sommatorie de Poisson. *C.R. Acad. Sci. Paris* t.306, Série I (1988), 373–376.
- [13] A. CÓRDOBA: Dirac combs. *Letters Math. Physics* **17** (1989), 191–196.
- [14] A. CÓRDOBA, J. CILLERUELO: *La teoría de los números*. Mondadori, 1992.
- [15] A. CÓRDOBA, F. CHAMIZO: One-Dimensional Crystals and Quadratic Residues. *J. Number Theory* **65** (1997), 101–104.
- [16] A. CÓRDOBA, P. FERNÁNDEZ: Convergence and divergence of rearranged Fourier series. *SIAM J. Math. Anal.* **29** (1998), no. 5, 1129–1139.
- [17] H. DAVENPORT: *Multiplicative Number Theory*. Springer Verlag, 1980.
- [18] M. ESCOBEDO: On a characterisation of Dirac measures. *Proc. Royal Soc. Edinburgh* **103A** (1986), 253–264.
- [19] F. A. GRÜNBAUM, C. MOORE: The Use of Higher-Order Invariants in the Determination of Generalized Patterson Cyclotomic Sets. *Acta Cryst.* **A51** (1995), 310–323.

- [20] D. HARKER, J. KASPER: Phases of Fourier coefficients directly from crystal diffraction data. *Acta Crystallographica* **1** (1948), 70–75.
- [21] H. HAUPTMAN, J. KARLE: *The solution of the phase problem: I. The centrosymmetric crystal*. ACA Monograph No. 3. Pittsburgh, 1953.
- [22] J. KARLE, H. HAUPTMAN: The phases and the magnitudes of the structure factors. *Acta Crystallographica* **3** (1950), 181–187.
- [23] A. KLUG: Joint probability distributions of structure factors and the phase problem. *Acta Crystallographica* **11** (1958), 515–543.
- [24] T. W. KÖRNER: Divergence of decreasing rearranged Fourier series. *Ann. Math.* **144** (1996), 167–180.
- [25] Y. MEYER: *Algebraic Numbers and Harmonic Analysis*. North-Holland, Amsterdam, 1972.
- [26] S. NAYA, I. NITTA, T. ODA: *Acta Crystallographica* **19** (1965), 734–747.
- [27] A. M. ODLYZKO, B. POONEN: Zeros of polynomials with 0,1 coefficients. *L'Enseignement Mathématique* t. 39 (199), 317–348.
- [28] L. PAULING, M. D. SHAPELL: The crystal structure of byxbyite and the C-modification of the sexquioxides. *Z. Kristall.* **75** (1930), 128–142.
- [29] A. L. PATTERSON: A direct method for the determination of the components of interatomic distances in crystals. *Z. Kristall.* **90** (1935), 517–542.
- [30] A. L. PATTERSON: Homometric structures. *Nature* **143** (1939), 939–940.
- [31] A. L. PATTERSON: Ambiguities in the X-ray analysis of crystal structure. *Phys. Rev.* **65** (1944), 195–201.
- [32] J. ROSENBLATT: Phase Retrieval. *Commun. Math. Phys.* **95** (1984), 317–343.
- [33] J. ROSENBLATT: Determining a Distribution from the modulus of its Fourier Transform. *Complex Variables* **10** (1988), 319–326.
- [34] J. ROSENBLATT, P. SEYMOUR: The structure of homometric sets. *SIAM J. Alg. Disc. Meth.* **3** (1982), 343–350.
- [35] W. RUDIN: *Fourier Analysis on Groups*. Interscience Publishers, 1990.
- [36] D. SAYRE: The squaring method: a new method for phase determination. *Acta Crystallographica* **5** (1952), 60–65.
- [37] M. SENECHAL: *Quasicrystals and geometry*. Cambridge Univ. Press, 1995.
- [38] D. SHECHTMAN, I. BLECH, D. GRATIAS, J. W. CAHN: Metallic phase with long-range orientational order and no translational symmetry. *Phys. Rev. Letters* **53** (1984), 1951–1953.
- [39] M. R. SCHROEDER: *Number Theory in Science and Communication with Applications*. Springer-Verlag, 1990.
- [40] T. TAO: On the Almost Everywhere Convergence of Wavelet Summation Methods. *Applied and Computational Harmonic Analysis* **3** (1996), 384–387.
- [41] R. C. VAUGHAN: The L^1 mean of exponential sums over primes. *Bull. London Math. Soc.* **20** (1988), 121–123.
- [42] A. J. C. WILSON: The probability distribution of X-ray intensities. *Acta Crystallographica* **2** (1949), 318–321.
- [43] A. ZYGMUND: *Trigonometric Series*. Cambridge University Press, 1988.